

MARCOS FREITAS DE MORAES

## **MODELO MATEMÁTICO PARA PREVER A VAPORIZAÇÃO EM ANTECÂMARAS DE COMBUSTÃO**

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Ciências, Curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia - Programação Matemática - Setores de Tecnologia e Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná.

Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Liliana Madalena Gramani Cumin

CURITIBA  
2005

## **TERMO DE APROVAÇÃO**

**MARCOS FREITAS DE MORAES**

### **MODELO MATEMÁTICO PARA PREVER A VAPORIZAÇÃO EM ANTECÂMARAS DE COMBUSTÃO**

Dissertação aprovada como requisito parcial à obtenção de grau de Mestre em Ciências no Curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia - Área de Concentração Programação Matemática - Setores de Tecnologia e Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, pela seguinte banca examinadora:

---

Orientadora: Prof<sup>ª</sup>. Liliana M. Gramani Cumin, D. Sc.  
Departamento de Matemática - UFPr

---

Prof. Mauro Chierici Lopes, D. Sc.  
Departamento de Química - UNICENTRO

---

Prof<sup>ª</sup>. Neida M. Patias Volpi, D. Sc.  
Departamento de Matemática - UFPr

---

Prof. Volmir Eugênio Wilhelm, D. Sc.  
Departamento de Matemática - UFPr

Curitiba, 08 de Março de 2005.

*A Deus, meu muito obrigado.*

*A minha amada esposa Amalia pelo seu  
carinho, compreensão, dedicação, amor  
e paciência em todos os momentos de-  
dicados a esta dissertação.*

*Aos meus filhos Eduarda e Murilo que  
também sempre estiveram ao meu la-  
do e entenderam a minha ausência em  
certos momentos de suas vidas.*

# Agradecimentos

Ao longo desta dissertação de mestrado, recebi o apoio de diversas pessoas, sendo assim agradeço em especial:

- ◇ À Professora Liliana Madalena Gramani Cumin pela sua orientação do trabalho;
- ◇ Aos professores do Curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, Programação Matemática - UFPr;
- ◇ Aos coordenadores do Curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia - MINTER - UFPr - Prof. Anselmo Chaves Neto e UNICENTRO - Prof. Osmar Ambrósio de Souza;
- ◇ Aos meus colegas de estudo do Curso, que sempre estiveram dispostos a ajudar nos momentos mais difíceis no decorrer dos créditos;
- ◇ Ao meu amigo Dagoberto Goltz, engenheiro químico, que abriu espaço em seu tempo de trabalho para me ajudar nas pesquisas;
- ◇ Ao amigo Prof. Maico Taras Cunha, departamento de química da Unicentro, pelo apoio em algumas pesquisas;
- ◇ À amiga Prof<sup>a</sup>. Raquel Carvalho Salmon, departamento de Letras da Unicentro, pelas aulas particulares de inglês;
- ◇ A todos os meus colegas de trabalho, tanto da Unicentro como do Colégio Campo Real, que sempre me incentivaram para o completar desta jornada de estudos.

## Resumo

Adulterações profundas nos combustíveis atualmente utilizados, alteram os resultados e as previsões quanto ao desempenho, rendimento e emissões de poluentes. A qualidade dos combustíveis tem sido muito questionada, de forma que o refino do petróleo assume um perfil extremamente importante para desenvolver novas tecnologias. A pesquisa destes novos processos estende a análise do combustível como um sistema físico de multicomponente. Sendo fundamental o conhecimento dos mecanismos de evaporação e combustão das gotas para uma melhor compreensão do fenômeno de combustão. Esta pesquisa permite o desenvolvimento de um produto que agrega um maior aproveitamento de matérias-primas disponíveis nas refinarias. Assim, a modelagem matemática inicia-se com a identificação do sistema, em seu estado termodinâmico, o qual é definido por algumas propriedades, tais como, energia interna, entalpia, calores latentes de vaporização de substâncias puras, pressão de vapor e calor específico. Essas propriedades dependerão de dimensões fundamentais tais como comprimento, tempo, massa, temperatura e quantidade de substância. As propriedades físico-químicas dos compostos também são consideradas, sendo descritas como as propriedades de uma mistura envolvendo a densidade, a massa atômica e molecular, a massa molar, o número de mols, a fração mássica, a difusividade mássica e o coeficiente de transferência de calor. Com isto, pode-se expressar um sistema de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem, envolvendo a variação do raio das gotas, a taxa de variação entre a pressão parcial dos compostos e a temperatura do gás, a variação da variação volumétrica da água, a variação da massa de vapor d'água e da soma do número de mols de vapor da água com a da gasolina evaporada, calculadas por método algébrico e a variação da temperatura das gotas e da temperatura do gás terão suas aproximações através do método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

**Palavras-chave:** combustão, vaporização, método numérico.

# Abstract

Deep adulterations in fuels currently used have modified the results and the preview of behavior, in relation to the performance, income and emission of pollutants. The quality of fuels has been questioned, so much that the refining of oil assumes an extremely important role for the development of new technologies. The research of these new processes extends the analysis of the fuel as a physical system of multicomponent. Since basic the knowledge of the mechanisms of evaporation and combustion of droplets for a better understanding of the combustion phenomenon. Is fundamental this research allows the development of a product that adds a better use of raw material exploitation in the refineries. Thus, the thermodynamic modeling starts at the identification of the system, in its thermodynamic state, which is defined by some features, such as internal energy, enthalpy, latent heats of pure substance vaporization, basic dimensions such as length, time, mass, temperature and amount of substance. The physical-chemical features of composites is also considered, by describing the features of a mixture involving the density the atomic and molecular mass, the molar mass and the number of mol, the mass fraction, the mass diffusivity and the coefficient of heat transference. To this, a system of usual distinguishing equations of 1st order may be expressed, involving the variation of the radius of droplets, the variation rate between the partial pressure of composites and the gas temperature, the variation of volumetric variation of water, the variation of steam mass and the sum of the number of steam mol with evaporated the gasoline, calculates by algebric method and the variation of droplets temperature and the gas temperature have got its approach through the method of Runge-Kutta of 4th order.

**Key-words:** combustion, vaporization, numerical method.



# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>i</b>
<b>Resumo</b>	<b>ii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iii</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>viii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>ix</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivos Gerais . . . . .	3
1.2 Objetivos Específicos . . . . .	3
1.3 Metodologia do Trabalho . . . . .	3
1.4 Importância do Trabalho . . . . .	4
1.5 Limitações do Trabalho . . . . .	4
1.6 Organização do Trabalho . . . . .	4
<b>2 O Estudo da Vaporização</b>	<b>7</b>
2.1 A Estrutura do Modelo de Vaporização Proposto . . . . .	8
2.2 Hipóteses Consideradas no Modelo que Envolve o Estudo da Gota . . . . .	10
2.3 Comportamento Dinâmico . . . . .	12
<b>3 Fundamentação Teórica</b>	<b>13</b>
3.1 Fundamentos do Balanço de Massa . . . . .	13
3.1.1 Conservação de Massa para um Volume de Controle	13
3.1.2 Formas de Balanço do Fluxo de Massa . . . . .	16
3.2 Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias . . .	18
3.2.1 Sistema de Equações Diferenciais . . . . .	18
3.3 Métodos Numéricos para Problemas que Envolvam Equações Diferenciais Ordinárias . . . . .	19
3.3.1 Breve Referência Histórica . . . . .	19

3.3.2	Os Métodos Numéricos . . . . .	20
3.3.3	Problemas de Valor Inicial (PVI) . . . . .	21
3.3.4	Métodos de Série de Taylor . . . . .	22
3.4	Métodos de Runge-Kutta . . . . .	25
3.4.1	Definições . . . . .	25
3.4.2	Método de Euler ou Runge-Kutta (RK) de 1ª Ordem . . . . .	25
3.4.3	Método Runge-Kutta de 4ª Ordem . . . . .	28
3.4.4	Comparação entre os Métodos de Euler ou Runge-Kutta (RK) de 1ª Ordem e de Runge-Kutta de 4ª Ordem . . . . .	36
3.5	Função de Distribuição das Gotas . . . . .	38
3.5.1	Função Densidade de Probabilidade dos Diâmetros Médios das Gotas . . . . .	38
3.5.2	Distribuições Típicas . . . . .	38
3.5.3	Distribuição de Probabilidade Gaussiana ou Normal . . . . .	39
<b>4</b>	<b>A Modelagem Matemática</b>	<b>42</b>
4.1	O que é Modelo Matemático? . . . . .	42
4.2	O que é Modelagem Matemática? . . . . .	43
4.2.1	Procedimentos para Elaborar uma Modelagem . . . . .	44
<b>5</b>	<b>Modelo do Sistema Multicomponente</b>	<b>47</b>
5.1	Simbologia . . . . .	48
5.2	A Quantidade de Equações Diferenciais Necessárias no Modelo . . . . .	49
5.3	Quantidade de Iterações e Intervalo de Integração . . . . .	50
5.4	Equações Auxiliares . . . . .	50
5.4.1	Cálculo dos Raios Iniciais das Gotículas . . . . .	51
5.4.2	Distribuição Gaussiana ou Normal das Gotas . . . . .	51
5.4.3	Cálculo dos Volumes Iniciais das Gotículas . . . . .	52
5.4.4	Massa de uma Gotícula . . . . .	52
5.4.5	Número de Mols . . . . .	52
5.4.6	Cálculo da Densidade do Gás . . . . .	53
5.4.7	Pressão Parcial dos Compostos . . . . .	53
5.4.8	Pressão Parcial da Água . . . . .	54
5.4.9	Difusividades Mássicas . . . . .	54
5.4.10	Cálculo do Coeficiente de Transferência de Calor . . . . .	57
5.4.11	Cálculo dos Calores Específicos . . . . .	57
5.4.12	Cálculo do Volume da Câmara . . . . .	58
5.4.13	Raio Adimensional . . . . .	58
5.4.14	Cálculo da Massa do Estado Gasoso . . . . .	58
5.4.15	Cálculo das Pressões de Vapor . . . . .	59
5.5	As Equações Diferenciais do Sistema . . . . .	59

5.5.1	Balanço de Massa na Gotícula . . . . .	59
5.5.2	1ª Equação: Variação do Raio Adimensional . . . . .	64
5.5.3	2ª Equação: Variação do Quociente entre a Pressão Parcial dos Compostos pela Temperatura do Gás . . . . .	65
5.5.4	3ª Equação: Variação do Número de Mols do Sistema . . . . .	65
5.5.5	4ª Equação: Variação da Fração Volumétrica da Água . . . . .	66
5.5.6	5ª Equação: Variação da Massa de Vapor de Água . . . . .	67
5.5.7	6ª Equação: Variação da Temperatura das Gotas . . . . .	68
5.5.8	7ª Equação: Variação da Temperatura do Gás . . . . .	70
5.5.9	Resumo do Sistema de EDO's de 1ª Ordem que For- mam o Modelo . . . . .	75
5.6	Programação Computacional do Modelo . . . . .	77
5.6.1	A Metodologia do Programa Computacional . . . . .	77
5.6.2	O Fluxograma . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Resultados Numéricos e Discussões</b>	<b>80</b>
6.1	Simulação 1 . . . . .	81
6.2	Simulação 2 . . . . .	83
6.3	Simulação 3 . . . . .	86
<b>7</b>	<b>Conclusões</b>	<b>89</b>
<b>A</b>	<b>Tabelas</b>	<b>93</b>
<b>B</b>	<b>Fundamentos Físico-Químicos</b>	<b>95</b>
B.1	Termodinâmica . . . . .	95
B.2	Combustão Interna . . . . .	95
B.3	Dinâmica dos Fluidos . . . . .	97
B.4	Densidade . . . . .	97
B.5	Massa Atômica e Massa Molecular . . . . .	97
B.6	Mol, Massa Molar e Número de Mols . . . . .	98
B.7	Fração Mássica . . . . .	99
B.8	Difusividade Mássica . . . . .	99
B.9	Transferência de Calor . . . . .	99
B.10	Coefficiente de Transferência de Calor . . . . .	99
B.11	Calor . . . . .	100
B.12	Energia Interna . . . . .	100
B.13	Primeira Lei da Termodinâmica . . . . .	101
B.14	Entalpia . . . . .	101
B.15	Lei dos Gases Ideais . . . . .	102
<b>C</b>	<b>Telas do Programa</b>	<b>105</b>

<b>D Arquivos Finais.dat e Resulta.dat - S1</b>	<b>107</b>
<b>E Programa Fonte</b>	<b>118</b>
<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>134</b>

# Lista de Figuras

3.1	Representação de um Volume de Controle. . . . .	14
3.2	Fluxo de massa em termos locais. . . . .	16
3.3	Gráfico com um passo. . . . .	26
3.4	Gráfico representando o Método de Euler. . . . .	27
3.5	Gráfico do Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem. . . . .	31
3.6	Gráfico da Distribuição Gaussiana das Gotas . . . . .	41
4.1	Esquema do processo de modelagem matemática. . . . .	44
4.2	Dinâmica da modelagem matemática. . . . .	46
5.1	Transporte Molecular de uma espécie $A$ de $y - a$ até $y$ . . . .	55
5.2	Fluxograma do Programa . . . . .	79
6.1	Gráfico da Temperatura das Gotículas, Temperatura do Gás e da Umidade pelo Tempo - S1 . . . . .	83
6.2	Gráfico da Temperatura das Gotículas e Temperatura do Gás pelo Tempo - S2 . . . . .	85
6.3	Gráfico da Umidade e % de Condensação de Água pelo Tempo - S2 . . . . .	86
6.4	Gráfico dos Raios e Temperatura das Gotículas pelo Tempo - S3 . . . . .	87
B.1	Motor a Combustão Interna. . . . .	96
C.1	Tela Inicial do Programa . . . . .	105
C.2	Tela dos Dados de Entrada . . . . .	106
C.3	Tela dos Dados de Saída . . . . .	106

# Lista de Tabelas

3.1	Valores de $y' = 2xy$ encontrados pelo Método de Euler ou RK de 1ª ordem. . . . .	28
3.2	Constantes de Butcher . . . . .	29
3.3	Valores das Constantes para RK de 4ª Ordem . . . . .	30
3.4	Valores de $y' = 2xy$ encontrados pelo Método de Runge-Kutta de 4ª ordem. . . . .	35
3.5	Comparação dos Métodos para $y' = 2xy$ , com $y(1) = 1$ e $h = 0,1$ . . . . .	37
3.6	Amostra dos Valores dos Raios das Gotas . . . . .	41
6.1	Temperatura Final das Gotículas na Simulação 1 . . . . .	81
6.2	Resumo Geral da Simulação 1 . . . . .	82
6.3	Temperatura Final das Gotículas na Simulação 2 . . . . .	84
6.4	Resumo Geral da Simulação 2 . . . . .	85
6.5	Temperatura Final das Gotículas na Simulação 3 . . . . .	87
6.6	Resumo Geral da Simulação 3 . . . . .	88
A.1	Massa Molar dos Compostos em $g/mol$ . . . . .	93
A.2	Parâmetros de Antoine para Pressão de Vapor . . . . .	93
A.3	Calor Específico dos Compostos em $cal/(gK)$ . . . . .	94
A.4	Calor de Vaporização dos Compostos em $J/mol$ . . . . .	94

# Capítulo 1

## Introdução

Hoje em dia, cientistas e engenheiros são cada vez mais confrontados com fenômenos complexos sobre a combustão, que dependem de processos inter-relacionados da mecânica dos fluídos, transferência de calor e massa, termodinâmica e turbulência. Conhecimento sobre conceitos fundamentais destes processos, requer dos engenheiros e cientistas base técnica e treinamento para solução de vários problemas de combustão. A investigação de problemas reais no campo da combustão na verdade já começou [1]. As técnicas para formulação e solução desses problemas certamente receberão atenções redobradas nos anos adiantes.

Não há solução técnica que possa substituir a parcela de responsabilidade do uso de um combustível de boa qualidade na manutenção do desempenho, durabilidade e níveis de emissões previstas no projeto de um motor. O desenvolvimento de motores realiza-se mediante ensaios com combustíveis padronizados. Porém, o estabelecimento de um combustível padrão, só trará efeitos positivos sobre a frota circulante e ao meio ambiente, se o combustível distribuído regularmente aos consumidores, obedecer a uma especificação próxima do padrão. Portanto, adulterações nos combustíveis utilizados, alteram os resultados e as previsões quanto ao desempenho, rendimento, durabilidade e emissões de poluentes.

A influência das propriedades do combustível no consumo, desempenho, durabilidade e emissões é decisiva. A qualidade dos combustíveis tem sido muito questionada ultimamente. Por exemplo, o aumento da octanagem<sup>1</sup> foi uma necessidade para a fabricação de motores mais potentes e econômicos e a retirada do chumbo para permitir a introdução de catalisadores para redução das emissões de poluentes foram decisões importantes para acompanhar a tendência mundial, implicando ainda mais no desenvolvimento desses motores [1].

Diante destas informações, o refino do petróleo assume um perfil extremamente importante para desenvolver tecnologias que permitam, de forma econômica e competitiva, uma maior participação no mercado mundial. Uma das pesquisas de novos processos estende-se à análise do combustível como um sistema físico de multicomponente multigotícula, isto é, através de gotículas formadas pela vaporização dos atomizadores<sup>2</sup>.

Kuo [2] comenta que é fundamental o conhecimento dos mecanismos de evaporação e combustão das gotículas para uma melhor compreensão do fenômeno da combustão. Para a combustão ocorrer com eficiência, é necessária uma mistura de combustível e ar. Em casos especiais a mistura é separada na combustão, mas em grande parte do processo de combustão por vaporização isto ocorre ao mesmo tempo. A combustão por vaporização ocorre nos motores dos foguetes que utilizam combustíveis líquidos, turbinas de gás, motores de automóveis movidos a álcool, gasolina e diesel, caldeiras industriais, entre outros. Em meio a esta variedade de aplicações, os modelos estudados e desenvolvidos para a combustão por vaporização reduzem os custos dos projetos, tendo assim, um papel importante no sistema.

---

<sup>1</sup>Medida convencional do comportamento antidetonante de um combustível de motor de combustão interna.

<sup>2</sup>Atomizadores, também conhecidos como "Sprays" e estão presentes em grande parte do ramo da indústria, comércio e agricultura; em nosso caso serão tratados como os bicos injetores de combustíveis.



## 1.1 Objetivos Gerais

O objetivo da presente pesquisa é desenvolver uma modelagem matemática para prever a vaporização de misturas combustíveis em antecâmaras de combustão, simulando através de um "software" as fases líquida e gasosa do combustível dentro da antecâmara, fornecendo dados importantes como as variações de temperatura, pressão e composição do combustível.

## 1.2 Objetivos Específicos

Especificamente, nesta pesquisa pretende-se desenvolver um "software" que irá analisar uma mistura combustível através de um sistema multicomponente multigotícula. A mistura será selecionada pelo usuário bem como o raio das gotas, a quantidade de gotas e as frações mássicas de cada componente. Com estes dados de entrada, o "software" calculará várias equações que serão chamadas de equações auxiliares para posterior substituição nas equações diferenciais de 1ª ordem. Duas equações diferenciais de 1ª ordem terão sua solução pelo método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem. Os resultados calculados pelo "software" serão apresentados em gráficos e tabelas.

## 1.3 Metodologia do Trabalho

A metodologia do trabalho consiste na apresentação do problema, em seguida, trata-se de desenvolver um sistema de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem composto pelas equações físico-químicas auxiliares as quais determinarão os resultados; utiliza-se o método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem para a aproximação de duas equações diferenciais desse sistema, sendo que as outras equações diferenciais têm sua solução através da substituição direta das

variáveis; desenvolveu-se um programa de computador na linguagem Fortran para agilizar e otimizar os cálculos e finalmente validar o problema proposto.

## **1.4 Importância do Trabalho**

O modelo matemático aplicado para esta simulação de análise de combustíveis, resultará no desenvolvimento de combustíveis adequados à evolução de novos motores de combustão. O desenvolvimento deste produto agregará um maior aproveitamento de matérias-primas disponíveis nas refinarias denominando um produto de maior qualidade adequado às grandes exigências do mercado automobilístico.

## **1.5 Limitações do Trabalho**

No momento em que o usuário informa os dados de entrada, não se sabe ao certo o quanto estes dados que estão sendo digitados estão próximos da realidade. Quanto mais verdadeiros forem estes dados melhor será a simulação.

No modelo apresentado a gota na fase líquida é considerada multicomponente, pois os combustíveis são misturas de vários compostos e algumas simplificações para facilitar o processo de um modelo de gota são apresentadas nos capítulos posteriores.

## **1.6 Organização do Trabalho**

A forma de organização dessa pesquisa segue uma seqüência lógica para familiarizar o leitor com todos os pormenores necessários para o entendimento do modelo proposto.

O capítulo 2 inicia-se com o estudo da vaporização, descrevendo o problema proposto, informado da importância dos modelos termodinâmicos estudados para o avanço científico e quais propriedades mensuráveis, como calor, energia interna, entalpia, calores latentes de vaporização, pressão de vapor e calor específico farão parte da pesquisa. Essas propriedades dependem de dimensões fundamentais tais como comprimento, tempo, massa, temperatura e quantidade de substância. Ainda no mesmo capítulo, determina-se quais variáveis serão utilizadas no sistema de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem: (a) a variação do raio das gotas; (b) o gradiente<sup>3</sup> da temperatura das gotas e da temperatura do gás; (c) a taxa de variação entre a pressão parcial dos compostos e a temperatura do gás; (d) o gradiente da variação volumétrica da água; (e) o gradiente da massa de vapor de água; e (f) a soma do número de mols de vapor da água com a da gasolina evaporada.

No capítulo 3 é abordada a fundamentação teórica necessária para as definições físico-químicas e para a utilização dos métodos numéricos aplicado às equações diferenciais.

No capítulo 4 é apresentada uma fundamentação sobre a modelagem matemática, seus conceitos, suas aplicações e a importância da modelagem para soluções reais do nosso cotidiano.

O capítulo 5 apresenta o modelo que envolve o estudo das gotas num processo de vaporização, seus estudos recentes, seu comportamento dinâmico e algumas simplificações [1] no processo para padronizar e facilitar a formulação, as funções densidade e as funções de distribuição das gotas.

A estruturação, elaboração, aplicação e solução do modelo matemático proposto nesta pesquisa são apresentados no capítulo 6. Também é apresentado a formulação computacional, com o fluxograma de funcionamento do programa, as telas do programa e a forma de apresentação dos resultados com o intuito

---

<sup>3</sup>Medida da variação de determinada característica de um meio, de um ponto para outro desse meio.

de ilustrar o desempenho computacional do método proposto.

No Capítulo 7 encontram-se as análises dos resultados obtidos através de tabelas e gráficos, bem como as discussões sobre o modelo proposto em decorrência do desenvolvimento e da aplicação da metodologia adotada.

O último capítulo ficou destinado às conclusões e recomendações para trabalhos futuros.

## Capítulo 2

# O Estudo da Vaporização

O estudo da vaporização envolve diversas áreas da engenharia referentes à dinâmica dos fluidos, transferência de calor e massa, atomização e dinâmica multifase. A solução de sistemas deste tipo inclui a solução de equações de conservação da massa, da energia e do movimento, para cada fase. Em algumas aplicações o fluxo de ar não é afetado pela presença das gotas, noutras ele é dependente destas, como no caso da nossa pesquisa.

Os modelos de vaporização apresentam-se com grande aceitação nas áreas de pesquisa e um dos seus objetivos principais é a redução de tempo e custo no desenvolvimento do processo, mesmo onde a modelagem é relativamente complicada, os testes são caros, as penalidades por defeitos nos testes são severas e o tempo de desenvolvimento é limitado. Por exemplo, um modelo unidimensional de vaporização que é empregado para estimar a performance dos combustíveis líquidos dos foguetes demorou vinte anos para ser desenvolvido.

Recentes avanços em pesquisas e experimentos tem criado novos interesses no desenvolvimento de modelos para processos de vaporização. A evolução e fabricação de computadores tem permitido solucionar modelos de equações de fluxo de turbulência e combustão que fazem parte do progresso teórico. Já o desenvolvimento de instrumentação para avaliar os modelos pre-

ditos envolve progressos como o equipamento Laser-Doppler [3] que utiliza, por exemplo, o método de dispersão de luz para medir o tamanho de partículas.

O nosso estudo de vaporização visa analisar o comportamento dos combustíveis na antecâmara de combustão através das gotículas geradas por esta atomização, em seu estado termodinâmico.

A termodinâmica é uma ciência com amplas aplicações na área tecnológica. O seu desenvolvimento tem se ampliado fortemente devido a resultados computacionais que sofisticam os estados de equilíbrio e a análise de suas perturbações. Assim, a modelagem termodinâmica tem a sua importância fundamental para o avanço do conhecimento científico, o qual é definido por algumas propriedades mensuráveis, tais como energia interna, entalpia, calores latentes de vaporização de substâncias puras, pressão de vapor e calor específico. Essas propriedades dependerão de dimensões fundamentais tais como comprimento, tempo, massa, temperatura e quantidade de substância. As propriedades físico-químicas dos compostos também serão consideradas sendo descritas como as propriedades de uma mistura envolvendo a densidade, a massa atômica e molecular, a massa molar, o número de mols, a fração mássica, a difusividade mássica e o coeficiente de transferência de calor.

## **2.1 A Estrutura do Modelo de Vaporização Proposto**

O modelo de vaporização proposto nesta pesquisa, terá como base um sistema de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem que envolvem:

- a variação do raio adimensional das gotas;
- a variação do quociente entre a pressão parcial dos compostos pela temperatura do gás;

- a variação do número de mols de vapor de água e do combustível evaporado;
- a variação da fração volumétrica da água;
- a variação da massa de vapor de água;
- a variação da temperatura das gotas;
- a variação da temperatura do gás.

O sistema de equações diferenciais é constituído de  $2n + m + 4$  equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem, onde  $n$  é a amostra de raios de gotas e  $m$  é o número de compostos contidos na gasolina.

Assume-se que a câmara contém combustível líquido na forma de gotas e ar com certa umidade. A umidade relativa tende a aumentar no decorrer do processo, e quando chega a 100% o ar fica saturado de vapor da água e passa a ocorrer condensação do mesmo, formando água líquida. Como a vaporização é um fenómeno endotérmico, a temperatura da câmara decresce, podendo atingir valores abaixo de 0° C. Neste caso, passa a haver congelamento da água condensada, formando gelo. Tanto a condensação quanto a solidificação são fenómenos exotérmicos, logo abrandam a queda de temperatura.

O combustível é formado por uma composição de compostos definida pelo usuário. Em seu estágio atual, o modelo considera que os diversos compostos evaporam à mesma taxa, logo suas concentrações permanecem constantes. Devido a isto a densidade do combustível também é considerada constante.

Uma simulação da mistura injetada na antecâmara de combustão por um atomizador, isto é, da vaporização, é feita através de um raio médio das gotas fornecido pelo usuário, o qual gera uma distribuição para os raios das gotas. Também será fornecido quantos diâmetros diferentes das gotas serão utilizados na distribuição e os compostos desejados com as suas respectivas frações

mássicas. Posteriormente, determinadas quantidades são calculadas para que seus valores sejam inseridos nas equações. Estas quantidades referem-se ao:

- cálculo dos volumes iniciais das gotas;
- cálculo da densidade do estado gasoso;
- cálculo das difusividades mássicas;
- cálculo das pressões de vapor dos compostos;
- cálculo do coeficiente de transferência de calor;
- cálculo dos calores específicos do estado gasoso;
- cálculo do volume da câmara de combustão ocupado pelo ar necessário à combustão completa das gotas;
- cálculo da massa do estado gasoso.

As condições iniciais de pressão, temperatura e umidade também serão fornecidas como dados de entrada.

O método numérico aplicado a este PVI (problema de valor inicial) será o método de Runge-Kutta de 4ª ordem e o programa que irá encontrar a solução do sistema será desenvolvido em Lahey-Fujitsu Fortran 95 v5.0.

## **2.2 Hipóteses Consideradas no Modelo que Envolve o Estudo da Gota**

O processo individual da gota é um aspecto importante para o modelo de vaporização, para tanto, recentes trabalhos na área devem ser considerados. Em geral, os modelos do estudo da gota são abordados por controle computacionais particulares da análise de vaporização. Na análise deve-se considerar



os efeitos dos movimentos relativos da gota com respeito ao gás e ao fato de estar todo o processo em transição, isto é, as condições do ambiente e do líquido variam de acordo com o tempo de vida da gota na vaporização. Portanto, praticamente um modelo que estude a gota deve considerar a fase líquida como multicomponente, pois os combustíveis são misturas de vários compostos. A exemplo de Faeth [1], Silva *et al.* [4] e Bennett *et al.* [5], algumas simplificações são adotadas nesta pesquisa:

- i) As partículas são assumidas como esféricas, independente da possibilidade ou não de deformação aerodinâmica;
- ii) A vaporização é considerada diluída em todos os pontos do escoamento. A colisão das gotas é ignorada, assim como o efeito de gotas adjacentes no transporte de calor e massa, isto é, a correlação do arrasto e convecção da gotas têm espaçamentos infinitos e são empregados sem correção;
- iii) O escoamento ao redor da gota é considerado com sendo quase-permanente, isto é, a cada instante o escoamento se ajusta às condições locais e ao tamanho da gota;
- iv) A velocidade radial de evaporação da superfície da gota é desprezada;
- v) Os efeitos de arrasto e convecção são representados por correlações empíricas;
- vi) O transporte da fase gasosa tem base nas propriedades do meio ambiente, e os efeitos de flutuações turbulentas são desprezados;
- vii) Durante a vaporização, a superfície líquida assume equilíbrio termodinâmico com o vapor da mistura gasosa, desprezando a tensão superficial da gota;
- viii) A pressão é considerada constante e igual à pressão do meio ambiente.
- ix) A difusão de espécie deve-se apenas a gradientes de concentração, sendo desprezada a difusão térmica;

x) São desconsiderados qualquer efeito de radiação entre a gota e sua superfície. A taxa de transferência de calor por convecção da gota na vaporização é alta e a partícula é pequena, isto faz com que reduza a importância da radiação;

xi) O número de Lewis<sup>1</sup> é considerado unitário na modelação das trocas entre o ar e as gotas;

xii) As propriedades do meio gasoso são admitidas constantes para cada instante de tempo. Difusividade binária, calor específico e massa molecular são consideradas em todas as espécies;

xiii) Não há transporte no interior da gota, sendo suas propriedades consideradas uniformes e constantes a cada intervalo de tempo através de difusividade térmica infinita.

xiv) A vaporização é considerada como sendo monodispersa.

## 2.3 Comportamento Dinâmico

A correta ponderação das velocidades e distâncias alcançadas pela vaporização é de fundamental importância, pois determina os coeficientes de troca de calor e massa entre as gotas e o ar. Quando um líquido é aspergido em um ambiente não-condensável, ele induz uma troca de quantidade de movimento entre as gotas da vaporização e o gás, neste caso o ar. As gotas desaceleram devido ao arrasto aerodinâmico e o momento cedido pelas gotas é adquirido pelo ar. Isso cria um campo de velocidades no qual o ar é continuamente arrastado para dentro da vaporização. Durante este processo, o ar induzido promove uma evaporação mais rápida das gotas no limite da vaporização, causando uma eventual contração da mesma [4].

---

<sup>1</sup>É a razão entre a taxa de energia transportada e a taxa de massa transportada [2].

# Capítulo 3

## Fundamentação Teórica

A fundamentação teórica apresentada a seguir serve para orientar o leitor em certos termos que serão utilizados na pesquisa, além de definições e deduções necessárias ao projeto de modelagem.

### 3.1 Fundamentos do Balanço de Massa

Balanço de massa consiste na quantificação dos materiais que entram, saem e acumulam-se, num sistema de limites definidos. O balanço de massa baseia-se na lei de conservação de massa, onde nada é criado ou destruído e sim transformado. A expressão de um balanço de massa é desenvolvida sobre um volume de controle fechado e possui termos para entrada, saída, geração e acumulação de materiais dentro do volume em que a reação se processa [6, 7].

#### 3.1.1 Conservação de Massa para um Volume de Controle

O princípio da conservação de massa para volumes de controle <sup>1</sup>, consiste num sistema de que certa quantidade fixa de matéria  $M$  ocupando diferentes regiões num tempo  $t$  e num tempo após  $t + \Delta t$ ,  $M = m_{vc}(t)$  e  $M = m_{vc}(t + \Delta t)$ ,

---

<sup>1</sup>Ambientes fechados onde há entradas, trocas ou saídas de calor, de massa, etc. Por exemplo a antecâmara de combustão.

respectivamente.

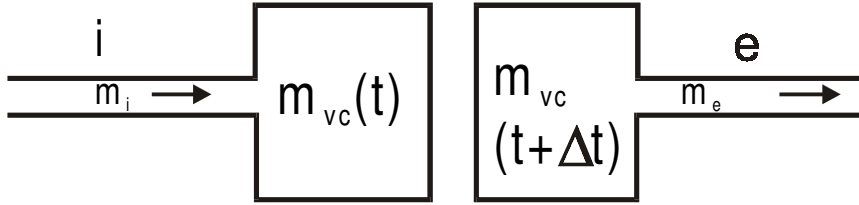


Figura 3.1: Representação de um Volume de Controle.  
[7]

No tempo  $t$ , a amostra de massa será considerada como a soma

$$\overline{M} = m_{vc}(t) + m_i, \quad (3.1)$$

onde  $m_{vc}(t)$  é a massa contida no volume de controle (*v.c.*) e  $m_i$  é a massa na região pequena indicada por  $i$ , adjacente ao volume de controle. Representado pelo esquerdo da figura (3.1).

Num intervalo de tempo  $\Delta t$ , toda a região de massa  $i$  vai para dentro do volume de controle, enquanto a massa  $m_e$ , inicialmente contida no volume de controle, sai para a região  $e$  adjacente ao mesmo. Representado pelo lado direito da figura (3.1).

No tempo  $t + \Delta t$  pode-se considerar a massa como sendo expressa por

$$M^* = m_{vc}(t + \Delta t) + m_e. \quad (3.2)$$

A massa da região  $i$ , ( $m_i$ ), e da região  $e$ , ( $m_e$ ), não são necessariamente iguais. Devido a conservação de massa, o conteúdo de massa contido no volume de controle está apenas sendo trocando. Então

$$\overline{M} = M^*, \quad (3.3)$$

$$m_{vc}(t) + m_i = m_{vc}(t + \Delta t) + m_e \quad (3.4)$$

ou arranjando

$$m_{vc}(t + \Delta t) - m_{vc}(t) = m_i - m_e. \quad (3.5)$$

Esta equação consiste no balanço de massa, com trocas de estado, de massas num volume de controle durante um intervalo  $\Delta t$ , sendo igual a quantidade de massa que entra menos a quantidade de massa que sai [7, 8].

A equação (3.5) pode ser expressa em função de  $\Delta t$ , então, dividindo toda a equação (3.5) por  $\Delta t$ , tem-se

$$\frac{(m_{vc}(t + \Delta t) - m_{vc}(t))}{\Delta t} = \frac{m_i}{\Delta t} - \frac{m_e}{\Delta t}. \quad (3.6)$$

O lado esquerdo da equação representa a taxa média da troca de massa num volume de controle durante um intervalo  $\Delta t$ . Os termos da direita são chamados de taxas de fluxo mássico durante um intervalo de tempo.

A fórmula da taxa instantânea é obtida fazendo o limite do lado esquerdo da equação (3.6), quando  $\Delta t$  tender a zero. O sistema e o volume de controle coincidem neste limite. Então, o termo da esquerda pode ser expresso por

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[ \frac{(m_{vc}(t + \Delta t) - m_{vc}(t))}{\Delta t} \right] = \frac{dm_{vc}}{dt}. \quad (3.7)$$

A expressão  $dm_{vc}/dt$  é a taxa de tempo da troca de massa contida no volume de controle num tempo  $t$ . No limite  $\Delta t$  próximo de zero, os termos da direita, ficarão respectivamente

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \dot{m}_i \quad (3.8)$$

e

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \dot{m}_e. \quad (3.9)$$

As expressões  $\dot{m}_i$  e  $\dot{m}_e$  são as taxas de fluxo mássico instantâneas de entrada e saída, respectivamente. Então o limite da equação (3.6) quando  $\Delta t \rightarrow 0$  é

$$\frac{dm_{vc}}{dt} = \dot{m}_i - \dot{m}_e. \quad (3.10)$$

A equação de balanço de massa para um volume de controle com várias entradas e saídas é dada por

$$\frac{dm_{vc}}{dt} = \sum_{i=1}^p \dot{m}_i - \sum_{e=1}^q \dot{m}_e. \quad (3.11)$$

### 3.1.2 Formas de Balanço do Fluxo de Massa

Em muitos casos pode ser conveniente expressar o balanço de massa em função das propriedades locais [9].

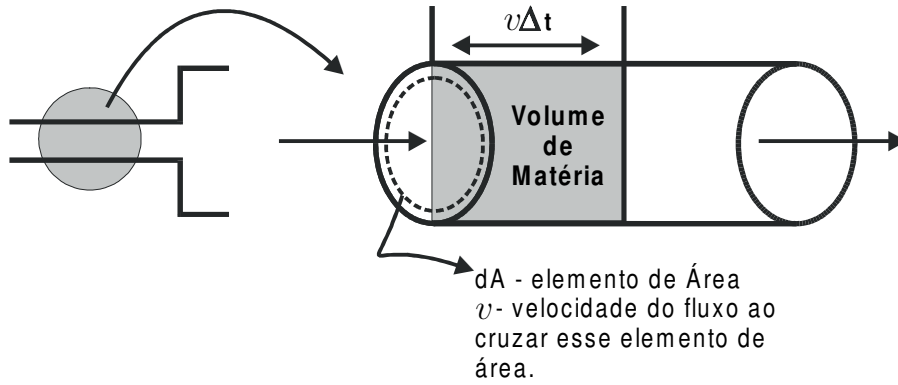


Figura 3.2: Fluxo de massa em termos locais.  
[9]

A equação que rege este sistema é

$$m_{vc}(t) = \int_V \rho dV, \quad (3.12)$$

onde  $m_{vc}(t)$  é a massa do volume de controle no tempo  $t$ ,  $\rho$  é a densidade da matéria e  $V$  o volume de matéria.

Na figura (3.2),  $v$  denota a componente da velocidade normal relativa, perpendicularmente ao elemento de área  $dA$  na direção do fluxo.

O volume de matéria que cruza  $dA$  durante um intervalo de tempo  $\Delta t$  é igual ao produto da área da base  $dA$  a altura  $v\Delta t$ . Multiplicando pela densidade  $\rho$  e a quantidade de massa que cruza  $dA$  no tempo  $t$ , tem-se

$$\left[ \text{Quantidade de massa que cruza } dA \text{ durante } \Delta t \right] = \rho(v\Delta t)dA. \quad (3.13)$$

Dividindo ambos os lados da equação (3.13) por  $\Delta t$  e fazendo o limite de  $\Delta t$  tender a zero, a taxa de fluxo de massa instantânea que cruza a área  $dA$  é

$$\left[ \text{Fluxo de massa instantâneo que cruza } dA \right] = \rho v dA. \quad (3.14)$$

Quando integra-se a expressão (3.14) em função da área  $A$ , a equação para o fluxo de massa fica

$$\dot{m} = \int_A \rho v dA. \quad (3.15)$$

A equação (3.15) pode ser aplicada tanto na entrada quanto na saída para checar a taxa de fluxo de massa que entra e sae do volume de controle.

Como  $m_{vc} = \int_V \rho dV$  e  $\dot{m}_{vc} = \int_A \rho v dA$ , a equação do balanço de massa pode ser escrita como

$$\frac{d}{dt} \int_V \rho dV = \sum_{i=1}^p \left( \int_A \rho v dA \right) - \sum_{e=1}^q \left( \int_A \rho v_n dA \right), \quad (3.16)$$

onde  $\rho v_n$  é o fluxo mássico por unidade de área.

Então um fluxo unidimensional pode ser escrito como [9],

$$\dot{m} = \rho v A, \quad (3.17)$$

onde o produto  $vA$  é a taxa do fluxo volumétrico cujas unidades são  $m^3/s$  ou  $ft^3/s$ .

## 3.2 Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

Uma equação diferencial ordinária (EDO) tem a forma geral:

$$F\left(x, y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2y}{dx^2}, \frac{d^3y}{dx^3}, \dots, \frac{d^ny}{dx^n}\right) = 0. \quad (3.18)$$

A equação apresentada é chamada de equação diferencial ordinária de  $n$ -ésima ordem. Ela é uma equação ordinária porque há somente uma variável independente,  $x$ . É de  $n$ -ésima ordem porque a maior derivada da função é de ordem  $n$ .

Uma função  $y(x)$ ,  $n$  vezes diferenciável, satisfazendo a equação anterior é chamada de solução desta equação. As equações diferenciais ordinárias têm várias soluções. É necessário que sejam dadas informações adicionais sobre  $y(x)$  e/ou sobre suas derivadas em valores específicos de  $x$  para que se obtenha a solução única. Para uma equação diferencial de ordem  $n$ , normalmente são suficientes  $n$  condições iniciais para garantir que a solução  $y(x)$  seja única. Se todas as  $n$  condições iniciais forem especificadas para um mesmo valor de  $x$ ,  $x_0$  por exemplo, tem-se um problema conhecido como Problema do Valor Inicial, PVI. Caso estas  $n$  condições iniciais sejam dadas para um valor de  $x$  diferente de  $x_0$ , tem-se um problema conhecido como Problema de Valor de Contorno, PVC. Em geral, é difícil a obtenção de soluções analíticas para equações diferenciais. Na maioria dos casos as soluções devem ser geradas através de métodos numéricos [10].

### 3.2.1 Sistema de Equações Diferenciais

Define-se como um sistema de equações diferenciais, um conjunto de funções que satisfaçam simultaneamente várias equações diferenciais. Tal conjunto de



funções é chamado de funções de solução do sistema de equações diferenciais [11]. Um sistema de equações diferenciais pode ser escrito sob a forma abaixo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dy_1}{dx} = F_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{dy_2}{dx} = F_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{dy_3}{dx} = F_3(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \dots\dots\dots \\ \frac{dy_n}{dx} = F_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \end{array} \right. \quad (3.19)$$

A solução geral deste sistema de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem é um conjunto de  $n$  funções,  $y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)$ , que contém  $p^*$  constantes arbitrárias ( $p^* \leq n$ ) e que verificam as equações. A solução particular é o conjunto de funções obtidas atribuindo-se valores particulares às constantes na solução geral.

Os sistemas de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem podem ser resolvidos por processos algébricos, mas na maior parte dos casos são por métodos numéricos.

### 3.3 Métodos Numéricos para Problemas que Envolvam Equações Diferenciais Ordinárias

### 3.3.1 Breve Referência Histórica

Os trabalhos preliminares na área dos métodos numéricos para a solução de equações diferenciais são devidos, entre outros, a Isaac Newton (1643-1729) e Gottfried Wilhelm Leibniz (1643-1716), no século XVII, bem como a Leonhard Euler (1707-1783), no século XVIII. Mas foi sobretudo devido aos trabalhos deste último que foram impulsionados os estudos que conduziram aos métodos que hoje conhecemos. Euler deduziu um processo iterativo que permitia determinar, de forma aproximada, a solução de um problema de condição inicial. A demonstração rigorosa de que, de fato, o processo por ele apresentado conduzia à solução da equação só foi apresentada mais tarde, em 1824, por

Augustine Cauchy (1789-1857) e melhorada por Rudolf Lipschitz (1832-1908) . No entanto, nem assim, o processo apresentado por Euler se tornou popular. A título de exemplo, Karl Weierstrass (1815-1897), famoso matematico alemão do século XIX trabalhou nestes assuntos sem conhecer os trabalhos de Cauchy e Lipschitz. No final do século XIX e princípio do século XX foram muito profícuos ao florescimento de métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais. Com os desenvolvimentos efetuados na teoria do calor por Fourier e na mecânica celeste por Adams, Bessel, Cauchy, Gauss, Laguerre, Laplace, Legendre, Leverrier, Poincaré e outros vieram tornar imprescindível a existência de esquemas para determinar a solução numérica de equações diferenciais. A balística foi outra ciência que começou a exigir resultados nesta área. Pode-se dividir os métodos numéricos para determinar a solução de equações diferenciais em duas grandes classes: por um lado, os chamados métodos de passo único aos quais pertence o método de Euler-Cauchy-Lipschitz; por outro os chamados métodos de passo múltiplo. Os sucessores do método de Euler-Cauchy-Lipschitz foram apresentados por K. Heun em 1900 e, sobretudo, por Carl Runge (1856-1927) em 1895 e 1908 e por Martin Wilhelm Kutta (1867-1944) em 1901, tendo sido considerados como generalizações das regras de integração [12].

Estes métodos tornaram-se bastante populares devido as suas propriedades e a sua fácil utilização.

### 3.3.2 Os Métodos Numéricos

Os métodos numéricos permitem determinar valores  $y_i \approx y(t_i)$  por meio de relações de recorrência de modo que o valor de  $y_{i+1}$  venha expresso em função de  $y_i, y_{i-1}, \dots, y_0$ , sendo  $y_0 = y(a) = \alpha$ . É usual agrupar os métodos numéricos para a resolução de problemas de condição inicial em duas grandes classes.

- **Métodos de passo único:** São métodos que determinam o valor de  $y_{i+1}$  apenas à custa de  $y_i$ . Podem ser divididos em dois tipos:

**Métodos explícitos:** São métodos em que o valor de  $y_{i+1}$  é determinado diretamente a partir de  $y_i$ . Estes métodos podem ser escritos na forma  $y_{i+1} = y_i + h\phi(t_i, y_i, h)$ .

**Métodos implícitos:** São métodos em que o valor de  $y_{i+1}$  depende implicitamente de si mesmo através de  $f$ . Estes métodos podem ser escritos na forma  $y_{i+1} = y_i + h\phi(t_i, t_{i+1}, y_i, y_{i+1}, h)$ . A função  $\phi$  que define os métodos é chamada de função de iteração ou função incremento do método numérico e  $h$  é o passo que vai de  $x_i$  até  $x_{i+1}$  com  $i = 0, 1, 2, \dots$

- **Métodos de passo múltiplo:** São métodos que determinam o valor de  $y_{i+1}$  à custa de  $y_i, y_{i-1}, \dots, y_{i-r+1}$ . Neste caso diz-se que o método é de  $r$  passos [13].

### 3.3.3 Problemas de Valor Inicial (PVI)

A razão mais forte para introduzir métodos numéricos para aproximar soluções de problemas de valor inicial (PVI) é a dificuldade de se encontrar, analiticamente, as soluções das equações. Em muitos casos, a teoria nos garante existência e unicidade de soluções, mas não se sabe qual é a expressão analítica desta solução.

Os métodos que foram estudados nesta pesquisa se baseiam em: dado o PVI

$$\begin{cases} y' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0 \end{cases} \quad (3.20)$$

constrói-se  $x_1, x_2, \dots, x_n$  que, embora não necessariamente, serão igualmente espaçados, ou seja:  $x_{i+1} - x_i = h$ , com  $i = 0, 1, 2, \dots$

Serão calculadas as aproximações  $y_i \approx y(x_i)$  nestes pontos.

Se para calcular  $y_i$  usa-se apenas  $y_{i-1}$  tem-se um método de passo simples, porém, se usado mais valores, tem-se um método de passo múltiplo [14].

### 3.3.4 Métodos de Série de Taylor

Os métodos que usam o desenvolvimento em Série de Taylor de  $y(x)$  teoricamente fornecem solução para qualquer equação diferencial. No entanto, do ponto de vista computacional, os métodos de Série de Taylor de ordem mais elevada são considerados inaceitáveis pois, a menos de uma classe restrita de funções  $f(x, y)$  o cálculo das derivadas totais envolvidas é extremamente complicado.

Suponha-se que, de alguma forma, tem-se as aproximações  $y_1, y_2, \dots, y_n$  para  $y(x)$ , em  $x_1, x_2, \dots, x_n$ .

Se  $y$  for suficientemente "suave", a Série de Taylor de  $y(x)$  em torno de  $x = x_n$  é:

$$\begin{aligned} y(x) &= y(x_n) + y'(x_n)(x - x_n) + y''(x_n) \frac{(x - x_n)^2}{2!} + \dots \\ &+ \frac{y^{(k)}(x_n)}{k!} (x - x_n)^k + \frac{y^{(k+1)}(\xi_x)}{(k+1)!} (x - x_n)^{k+1}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde  $\xi_x$  é o um valor entre  $x_n$  e  $x$  e fará parte no erro de truncamento, o qual é dado por

$$e(x) = \frac{y^{(k+1)}(\xi_x)}{(k+1)!} h^{k+1}. \quad (3.22)$$

Assim,

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) &\cong y(x_n) + y'(x_n)(x_{n+1} - x_n) + y''(x_n) \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{2!} + \dots \\ &+ y^{(k)}(x_n) \frac{(x_{n+1} - x_n)^k}{k!}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Se  $y_n^{(j)}$  representa a aproximação para a  $j$ -ésima derivada da função  $y(x)$  em  $x_n$ ,  $y^{(j)}(x_n)$ , e considerando  $h = (x_{n+1} - x_n)$ , tem-se para a equação (3.23):

$$y(x_{n+1}) \cong y_{n+1} = y_n + y'_n h + y''_n \frac{h^2}{2!} + \dots + y_n^{(k)} \frac{h^k}{k!}. \quad (3.24)$$

Portanto, os métodos de Série de Taylor são de ordem  $k$ . Para aplicar o método de Série de Taylor de ordem  $k$ :

$$y_{n+1} = y_n + y'_n h + \frac{y''_n}{2!} h^2 + \dots + \frac{y_n^{(k)}}{k!} h^k \quad (3.25)$$

tem-se que calcular  $y''_n, y'''_n, \dots, y_n^{(k)}$ .

Agora,  $y'(x) = f(x, y(x))$ . Então,

$$y''(x) = f_x(x, y(x)) + f_y(x, y(x))y'(x) = f_x + f_y f \quad (3.26)$$

em uma notação simplificada.

Assim, por exemplo, o método de Série de Taylor de 2ª ordem é

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} [f_x(x_n, y_n) + f_y(x_n, y_n)], \quad n = 0, 1, \dots \quad (3.27)$$

Analogamente, expressando a 3ª derivada

$$y'''(x) = f_{xx}(x, y(x)) + f_{xy}(x, y(x))y'(x) + [f_{yx}(x, y(x)) + f_{yy}(x, y(x))y'(x)]y'(x) + f_y(x, y(x))y''(x) = f_{xx} + f_{xy}f + (f_{yx} + f_{yy}f)f + f_y(f_x + f_y f), \text{ em notação simplificada.}$$

$$\text{Assim, } y'''(x) = f_{xx} + f_{xy}f + f_{yx}f + f_{yy}f^2 + f_x f_y + f_y^2 f$$

$$y'''(x) = f_{xx} + f_x f_y + 2f f_{xy} + f f_y^2 + f^2 f_{yy}. \quad (3.28)$$

E expressando a 4ª derivada em notação simplificada

$$y^{iv}(x) = f_{xxx} + f_{xx}f_y + 3.f.f_{xxy} + 3.f_x.f_{xy} + 5.f.f_y.f_{xy} + f_x.f_y^2 + 3.f^2.f_{xyy} + 3.f.f_x.f_{yy} + 4.f^2.f_y.f_{yy} + f.f_y^3 + f^3.f_{yyy}. \quad (3.29)$$

Então, o método de Série de Taylor de 4ª ordem pode ser expresso por

$$\begin{aligned}
y(x_{n+1}) \cong y_{n+1} = & y(x_n) + hf_n + \frac{h^2}{2}(f_x + f \cdot f_y) + \frac{h^3}{6}(f_{xx} + f_x \cdot f_y \\
& + 2f \cdot f_{xy} + f \cdot f_y^2 + f^2 \cdot f_{yy}) + \frac{h^4}{24}(f_{xxx} + f_{xx}f_y + 3f \cdot f_{xxy} \\
& + 3f_x \cdot f_{xy} + 5f \cdot f_y \cdot f_{xy} + f_x \cdot f_y^2 + 3f^2 \cdot f_{xyy} + 3f \cdot f_x \cdot f_{yy} \\
& + 4f^2 \cdot f_y \cdot f_{yy} + f \cdot f_y^3 + f^3 \cdot f_{yyy}) + O(h^5).
\end{aligned} \quad (3.30)$$

A quarta derivada,  $y^{iv}(x)$ , já nos mostra a dificuldade do seu desenvolvimento e dos cálculos [14].

Por exemplo, usar a Série de Taylor de 2ª ordem para encontrar a solução de  $y$  no ponto  $x = 2, 1$ , isto é,  $y(2, 1)$  para o seguinte PVI:

$$\begin{cases} xy' = x - y & (a) \\ y(2) = 2 & (b) \end{cases} \quad (3.31)$$

Da equação (3.31a) do sistema acima tem-se que,

$$y' = \frac{(x-y)}{x} = 1 - \frac{y}{x} \Rightarrow y'(2) = 1 - \frac{2}{2} = 0.$$

Calculando a segunda derivada de  $y$  a partir da equação (3.31a), tem-se

$$y'' = \frac{-y'}{x} + \frac{y}{x^2} \Rightarrow y''(2) = 0 + \frac{2}{4} = \frac{1}{2}.$$

Então,

$$y(x) = y(2) + (x - 2)y'(2) + \frac{(x-2)^2}{2}y''(2)$$

$$y(x) = 2 + \frac{1}{4}(x - 2)^2.$$

Calculando para  $y(2, 1)$ , obtém-se

$$y(2, 1) = 2 + 0,25(2, 1 - 2)^2 = 2,0025.$$

O valor exato calculado pelo "software" Maple é de 2,00238.

Caso se queira uma melhor aproximação, calcula-se a terceira derivada de  $y$ ,  $y'''$ , a partir de (3.31a) e aplica-se novamente a Série de Taylor.

Então,

$$y'''(x) = \frac{-y''}{x} + \frac{2y'}{x^2} - \frac{2y}{x^3}. \quad (3.32)$$

Substituindo os valores de  $y''(2) = 1/2$ ,  $y'(2) = 0$ ,  $y(2) = 2$  e  $x = 2$  na equação (3.32), obtém-se  $y'''(x) = -0,75$ .

Voltando a calcular na Série de Taylor, tem-se a seguinte forma,

$$y(x) = y(2) + (x - 2)y'(2) + \frac{(x-2)^2}{2}y''(2) + \frac{(x-2)^3}{6}y'''(2)$$

$$y(x) = 2 + \frac{1}{4}(x - 2)^2 + \frac{1}{8}(x - 2)^3.$$

Calculando novamente para  $y(2, 1)$ , obtém-se

$$y(2, 1) = 2 + 0,25(2, 1 - 2)^2 - 0,125(2, 1 - 2)^3 = 2,002375,$$

o qual é um valor bem mais aproximado do valor exato. Quanto maior for a ordem da Série de Taylor, melhor será a aproximação [14].

## 3.4 Métodos de Runge-Kutta

### 3.4.1 Definições

A idéia básica destes métodos é aproveitar as qualidades dos métodos de Série de Taylor e ao mesmo tempo eliminar sua maior dificuldade que é o cálculo de derivadas de  $f(x, y)$  que, conforme visto, torna os métodos de Série de Taylor computacionalmente inaceitáveis.

Pode-se dizer que os métodos de Runge-Kutta de 1ª e 4ª ordem se caracterizam pelas três propriedades:

- i) são de passo um ou simples;
- ii) não exigem o cálculo de qualquer derivada de  $f(x, y)$ ; com isto, deve-se calcular  $f(x, y)$  em vários pontos;
- iii) após expandir  $f(x, y)$  por Série de Taylor para função de duas variáveis em torno de  $(x_n, y_n)$  e agrupar os termos semelhantes, sua expressão coincide com a do método da série de Taylor de mesma ordem [14].

### 3.4.2 Método de Euler ou Runge-Kutta (RK) de 1ª Ordem

O método, também chamado de método das tangentes, constitui-se numa



Figura 3.3: Gráfico com um passo.  
[14]

técnica para aproximar soluções de equações diferenciais. Suponha que se queira aproximar a solução do problema de valor inicial (3.20).

Se  $h$  é um incremento positivo no eixo  $x$ , então se pode encontrar um ponto  $(x_1, y_1) = (x_0 + h, y_1)$ , na tangente à curva solução desconhecida em  $(x_0, y_0)$ , conforme mostra a figura (3.3). Para que haja precisão, deve-se escolher um passo razoavelmente pequeno.

Pela fórmula do coeficiente angular da reta tem-se:

$$\frac{y_1 - y_0}{(x_0 + h) - x_0} = y'_0 \text{ ou } y_1 = y_0 + hy'_0 \quad (3.33)$$

onde  $y'_0 = f(x_0, y_0)$ . Fazendo com que  $x_0 + h$  seja  $x_1$ , o ponto  $(x_1, y_1)$  na tangente é uma aproximação do ponto  $(x_1, y(x_1))$  da curva solução, isto é  $y_1 \approx y(x_1)$ .

Supondo um valor uniforme (constante) de  $h$ , pode-se obter uma sucessão de pontos  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$  que devem estar próximos dos pontos  $(x_1, y(x_1)), (x_2, y(x_2)), \dots, (x_n, y(x_n))$  da curva solução  $y$ .

Utilizando  $(x_1, y_1)$  pode-se obter  $y_2$ , que é a ordenada do ponto solução em uma nova tangente, como mostra a figura (3.4) a seguir.



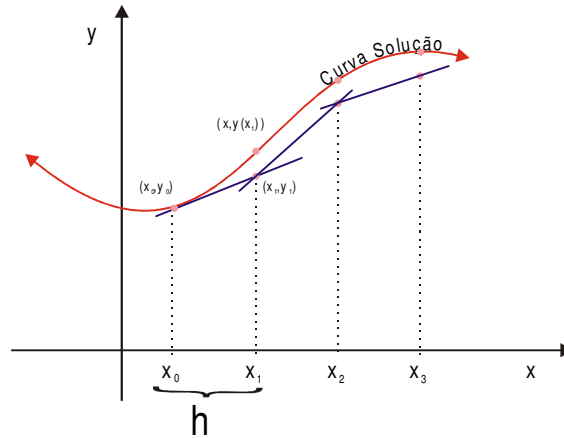


Figura 3.4: Gráfico representando o Método de Euler.  
[14]

Tem-se  $\frac{y_2 - y_1}{h} = y'_1$  ou  $y_2 = y_1 + hy'_1$  [13].

O número de iteração para cada problema é calculado por

$$\tau = \frac{b - a}{h} \quad (3.34)$$

onde  $b$  é igual ao ponto o qual se deseja aproximar ( $x_n$ ),  $a$  é o valor do ponto ( $x_0$ ) e  $h$  é o tamanho do passo.

Genericamente tem-se

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n = y_n + hf(x_n, y_n). \quad (3.35)$$

Para demonstrar a aplicação do Método de Euler ou RK de 1ª ordem, se calculará uma aproximação para um PVI dado no exemplo (3.1). Este PVI servirá de base para uma comparação entre os dois métodos estudados nesta pesquisa, o Método de Euler ou RK de 1ª ordem e o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem que será visto em seguida.

Exemplo 3.1 [14]: Dado o PVI:

$$\begin{cases} y' &= 2xy \\ y(1) &= 1 \end{cases} \quad (3.36)$$

Encontrar uma aproximação de  $y(1, 5)$  com  $h = 0, 1$ .

Então, tem-se que  $x_0 = 1$ ,  $y_0 = 1$  e  $h = 0,1$ . Substituindo na equação (3.35) e calculado o número de iterações pela equação (3.34) tem-se,

$$\tau = \frac{1,5-1}{0,1} = 5 \text{ iterações, logo } n = 0, \dots, 4.$$

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot (2 \cdot x_n \cdot y_n),$$

$$y_1 = 1 + 0,1 \cdot (2 \cdot 1 \cdot 1) = 1,2, \text{ logo } x_1 = 1,1 \text{ e } y_1 = 1,2, \text{ seguindo,}$$

$$y_2 = 1,2 + 0,1 \cdot (2 \cdot 1,1 \cdot 1,2) = 1,464, x_2 = 1,2 \text{ e } y_2 = 1,464,$$

$$y_3 = 1,464 + 0,1 \cdot (2 \cdot 1,2 \cdot 1,464) = 1,81536, x_3 = 1,3 \text{ e } y_3 = 1,81536,$$

$$y_4 = 1,81536 + 0,1 \cdot (2 \cdot 1,3 \cdot 1,81536) = 2,2873536, x_4 = 1,4 \text{ e } y_4 = 2,2873536,$$

$$y_5 = 2,2873536 + 0,1 \cdot (2 \cdot 1,4 \cdot 2,2873536) = 2,927808.$$

A tabela abaixo apresenta os valores encontrados para o PVI (3.36):

$x_n$	Euler ou RK 1ª ordem
1,00	1,000000
1,10	1,200000
1,20	1,464000
1,30	1,815360
1,40	2,287353
1,50	2,927808

Tabela 3.1: Valores de  $y' = 2xy$  encontrados pelo Método de Euler ou RK de 1ª ordem.

Na tabela (3.1) observa-se que o valor do Método de Euler ou RK de 1ª ordem para  $x_0 = 1$ , coincide com  $y_0 = 1$  porque o valor do passo é  $h = 0$ .

### 3.4.3 Método Runge-Kutta de 4ª Ordem

Os métodos de Runge-Kutta (RK) de 1ª e 4ª ordem, são métodos de passo simples, aplicados no PVI (3.20). Os chamados métodos explícitos de  $s$  estágios apresentam a forma geral:

$$y_{n+1} = y_n + \phi(x_n, y_n; h), \quad (3.37)$$

onde

$$\phi(x, y; h) = \sum_{i=1}^s b_i K_i, \quad (3.38)$$

com

$$\begin{aligned} K_1 &= hf(x, y), \\ K_2 &= hf(x + c_2 h, y + a_{21} K_1), \\ K_3 &= hf(x + c_3 h, y + a_{31} K_1 + a_{32} K_2), \\ K_4 &= hf(x + c_4 h, y + a_{41} K_1 + a_{42} K_2 + a_{43} K_3), \\ &\dots \\ K_s &= hf(x + c_s h, y + a_{s1} K_1 + a_{s2} K_2 + a_{s3} K_3 + \dots + a_{s,s-1} K_{s-1}), \end{aligned} \quad (3.39)$$

onde  $a_{j1}, \dots, a_{j,s-1}, b_i$  e  $c_j$  com  $i = 1, \dots, s$  e  $j = 2, \dots, s$  são constantes definidas para cada método particular. Usualmente, estas constantes são exibidas na notação de Butcher [15], segundo a tabela (3.2) abaixo:

0					
$c_2$	$a_{21}$				
$c_3$	$a_{31}$	$a_{32}$			
$\dots$	$\dots$	$\dots$			
$c_s$	$a_{s1}$	$a_{s2}$	$\dots$	$a_{s,s-1}$	
	$b_1$	$b_2$	$\dots$	$b_{s-1}$	$b_s$

Tabela 3.2: Constantes de Butcher

A tabela (3.3) a seguir, apresenta as Constantes de Butcher para o método de Runge-Kutta de 4ª ordem:

Seja o caso de  $s = 4$  na equação (3.39) para o PVI (3.20), então

$y_{n+1} = y_n + b_1 K_1 + b_2 K_2 + b_3 K_3 + b_4 K_4$  e expandindo em Série de Taylor em torno do ponto  $(x_n, y_n)$ , tem-se:

$$\begin{aligned} y(x_{n+1}) \cong y_{n+1} &= y_n + b_1 hf(x_n, y_n) + b_2 hf(x_n + c_2 h, y_n + a_{21} K_1) \\ &+ b_3 hf(x_n + c_3 h, y_n + a_{31} K_1 + a_{32} K_2) \\ &+ b_4 hf(x_n + c_4 h, y_n + a_{41} K_1 + a_{42} K_2 + a_{43} K_3) \end{aligned} \quad (3.40)$$

0				
1/2	1/2			
1/2	0	1/2		
1	0	0	1	
	1/6	1/3	1/3	1/6

Tabela 3.3: Valores das Constantes para RK de 4ª Ordem

onde  $K_1 = hf(x_n, y_n)$ , já está na forma desejada.

Substituindo  $f(x_n, y_n)$  por  $f_n$  para simplificar a forma de escrever, tem-se, então para  $K_2$ ,  $K_3$  e  $K_4$ ,

$$K_2 = hf(x_n + c_2h, y_n + a_{21}K_1) \approx hf_n + c_2h^2 \frac{\partial f_n}{\partial x} + a_{21}h^2 f_n \frac{\partial f_n}{\partial y},$$

$$K_3 = hf(x_n + c_3h, y_n + a_{31}K_1 + a_{32}K_2) \approx f_n + c_3h^3 \frac{\partial^2 f_n}{\partial x^2} + a_{31}h^3 f_n \frac{\partial^2 f_n}{\partial y^2} + a_{32}h^3 f_n' \frac{\partial f_n}{\partial y},$$

$$K_4 = hf(x_n + c_4h, y_n + a_{41}K_1 + a_{42}K_2 + a_{43}K_3) \approx f_n + c_4h^4 \frac{\partial^3 f_n}{\partial x^3} + a_{41}h^4 f_n \frac{\partial^3 f_n}{\partial y^3} + a_{42}h^4 f_n' \frac{\partial f_n}{\partial y} + a_{43}h^4 f_n'' \frac{\partial f_n}{\partial y}.$$

Para o método de quarta ordem tem-se o seguinte sistema:

$$b_1 + b_2 + b_3 + b_4 = 1,$$

$$b_2c_2 + b_3c_3 + b_4c_4 = \frac{1}{2},$$

$$b_2c_2^2 + b_3c_3^2 + b_4c_4^2 = \frac{1}{3},$$

$$b_2c_2^3 + b_3c_3^3 + b_4c_4^3 = \frac{1}{4},$$

$$a_{32}b_3c_2 + (a_{42}c_2 + a_{43}c_3)c_4 = \frac{1}{6},$$

$$a_{32}b_3c_2c_3 + (a_{42}c_2 + a_{43}c_3)b_4c_4 = \frac{1}{8},$$

$$a_{32}b_3c_2^2 + (a_{42}c_2^2 + a_{43}c_3^2)b_4 = \frac{1}{12},$$

$$a_{32}a_{43}b_4c_2 = \frac{1}{24}.$$

Para confirmar a utilização dos dados da tabela de Butcher [15] no sistema acima, seleciona-se a última linha do sistema e substitui-se pelas constantes já encontradas:

$$a_{32} = \frac{1}{2}, \quad a_{43} = 1, \quad b_4 = \frac{1}{6}, \quad c_2 = \frac{1}{2}, \quad a_{32}a_{43}b_4c_2 = \frac{1}{24},$$

aplicando então, na linha selecionada, obtém-se

$$a_{32}a_{43}b_4c_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{1} \cdot \frac{1}{6} \cdot \frac{1}{2} = \frac{1}{24},$$

confirmando, assim, a validade dos dados da tabela (3.3).

Existem várias soluções para o sistema e uma delas é dada pela fórmula clássica do método de Runge-Kutta de 4ª ordem, o qual será utilizado no trabalho:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4) \quad (3.41)$$

onde

$$K_1 = hf(x_n, y_n), \quad (3.42a)$$

$$K_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{K_1}{2}\right), \quad (3.42b)$$

$$K_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{K_2}{2}\right), \quad (3.42c)$$

$$K_4 = hf(x_n + h, y_n + K_3). \quad (3.42d)$$

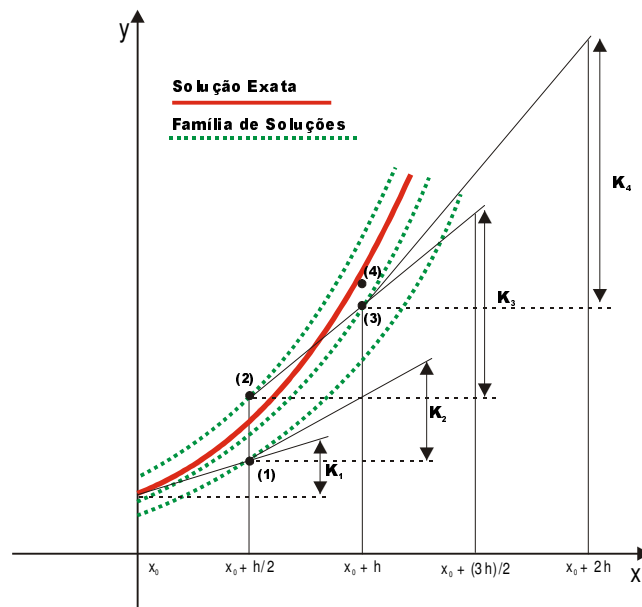


Figura 3.5: Gráfico do Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem.  
[12]

Na figura (3.5), observa-se os seguinte pontos:

(0)  $(x_0, y_0)$ ,

- (1)  $(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_1}{2}),$
- (2)  $(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{K_2}{2}),$
- (3)  $(x_0 + h, y_0 + K_3),$
- (4)  $(x_0 + h, y_1)$  onde  $y_1 = y_0 + \frac{1}{6}(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4).$

Pode-se interpretar a soma  $(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4)/6$  como um coeficiente angular médio. Nota-se que  $K_1$  é o coeficiente angular no extremo esquerdo do intervalo,  $K_2$  é o coeficiente angular no ponto médio utilizando-se a fórmula de Euler para ir de  $x_n$  a  $x_n + h/2$ ,  $K_3$  é uma segunda aproximação ao coeficiente angular no ponto médio e, finalmente,  $K_4$  é o coeficiente angular em  $x_n + h$  usando-se a fórmula de Euler e o coeficiente angular  $K_3$  para ir de  $x_n$  a  $x_n + h$ .

O número de iteração para o método de Runge-Kutta de 4ª ordem é dado da mesma forma que o método de Euler ou RK de 1ª ordem, pela equação (3.34).

Para mostrar como se aplica o método de Runge-Kutta de 4ª ordem, se calculará um valor aproximado da solução exata  $y = \phi(x)$  em  $x = 0,2$  para o problema de valor inicial apresentado no exemplo (3.2):

Exemplo (3.2) [14]: Dado o PVI

$$y' = 1 - x + 4y, \text{ com } y(0) = 1 \text{ e } h = 0,2.$$

Para este exemplo tem-se  $\tau = \frac{0,2-0}{0,2} = 1$  iteração, portanto  $n = 0$ .

Substituindo os dados do PVI do exemplo (3.1),  $y(0) = 1$ ,  $h = 0,2$  nas equações (3.42a) à (3.42d), obtém-se os valores de  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$  e  $K_4$  como se segue:

$$K_1 = hf(0; 1) = 0,2.(1 - 0 + 4.1) = 0,2.5 = 1,0 \quad (a)$$

$$K_2 = hf(0 + 0,2/2; 1 + 1,0/2) = 0,2.(0,1; 1,5) = 0,2.(1 - 0,1 + 4.1,5) = 1,38 \quad (b)$$

$$K_3 = hf(0 + 0,2/2; 1 + 1,38/2) = 0,2.(0,1; 1,69) = 0,2.(1 - 0,1 + 4.1,69) = 1,532 \quad (c)$$

$$K_4 = hf(0 + 0,2; 1 + 1,532) = 0,2.(0,2; 2,532) = 0,2.(1 - 0,2 + 4.2,532) = 2,1856 \quad (d)$$

Com os valores respectivos de (a) até (d), aplica-se na equação (3.41) e obtém-se,

$$y_1 = 1 + 1/6(1,0 + 2,1,38 + 2,1,532 + 2,1856) = 2,5016$$

O valor exato é  $\phi(0, 2) = 2,5053299$  calculado no "software" Maple. O valor encontrado pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem foi 2,5016, isto é, um erro de 0,00375 em relação ao valor exato.

Isto implica que, quanto menor for o passo  $h$  e maior for o número de casas decimais, melhor será a aproximação.

Aplicar-se-á agora, o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem no PVI (3.36) para se poder comparar as aproximações entre os Métodos de Euler ou RK 1ª ordem e o Runge-Kutta de 4ª ordem e observar a eficiência de cada método.

Exemplo 3.3 [14]: Dado o PVI (3.36), onde  $y' = 2xy$  e  $y(1) = 1$  e obter uma aproximação de  $y(1,5)$  com  $h = 0,1$ .

Calculado o número de iterações pela equação (3.34) tem-se  $\tau = \frac{1,5-1}{0,1} = 5$  iterações, portanto,  $n = 0, \dots, 4$ .

Então, tem-se que  $x_0 = 1$ ,  $y_0 = 1$  e  $h = 0,1$ . Substituindo nas equações (3.42a) à (3.42d), obtém-se para  $n = 0$ :

$$K_1 = hf(x_n, y_n),$$

$$K_1 = h.f(1; 1) = 0,1 \cdot (2 \cdot 1 \cdot 1) = 0,1 \cdot 2 = 0,2 \quad (a),$$

$$K_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}; y_n + \frac{K_1}{2}),$$

$$K_2 = h.f(1 + \frac{0,1}{2}; 1 + \frac{0,2}{2}) = 0,1 \cdot (2 \cdot 1,05 \cdot 1,1) = 0,1 \cdot 2,31 = 0,231 \quad (b),$$

$$K_3 = hf(x_n + \frac{h}{2}; y_n + \frac{K_2}{2}),$$

$$K_3 = h.f(1 + \frac{0,1}{2}; 1 + \frac{0,231}{2}) = 0,1 \cdot (2 \cdot 1,05 \cdot 1,1155) = 0,1 \cdot 2,34255 = 0,234255 \quad (c),$$

$$K_4 = hf(x_n + h; y_n + K_3),$$

$$K_4 = h.f(1+0,1; 1+0,234255) = 0,1.(2.1,1.1,234255) = 0,1.2,715361 = 0,27153161 \quad (d).$$

Calculados os valores respectivos de (a) até (d), substitui-se na equação (3.41) e obtém-se,

$$y_1 = 1 + \frac{1}{6}(0,2 + 2.0,231 + 2.0,234255 + 0,27153161) = 1,2336736.$$

Seguindo para  $n = 1$ , com  $x_1 = 1,1$ ,  $y_1 = 1,2336736$  e  $h = 0,1$ , tem-se,

$$K_1 = h.f(1,1; 1,2336736) = 0,1.(2.1,1.1,2336736) = 0,2714 \quad (a1),$$

$$K_2 = h.f(1,1 + \frac{0,1}{2}; 1,2336736 + \frac{0,2714}{2}) = 0,1.(2.1,15.1,369373) = 0,3149559 \quad (b1),$$

$$K_3 = h.f(1,1 + \frac{0,1}{2}; 1,2336736 + \frac{0,3149559}{2}) = 0,1.(2.1,15.1,391151) = 0,3199647 \quad (c1),$$

$$K_4 = h.f(1,1 + 0,1; 1,2336736 + 0,3199647) = 0,1.(2.1,2.1,553638) = 0,3728731 \quad (d1).$$

Calculados os valores respectivos de (a1) até (d1), substitui-se na equação (3.41) e obtém-se,

$$y_2 = 1,2336736 + \frac{1}{6}(0,2714 + 2.0,3149559 + 2.0,3199647 + 0,3728731) = 1,55269265.$$

Agora,  $n = 2$ ,  $x_2 = 1,2$ ,  $y_2 = 1,55269265$  e  $h = 0,1$ ,

$$K_1 = 0,1.(2.1,2.1,55269265) = 0,3726462 \quad (a2),$$

$$K_2 = 0,1.(2.1,25.1,7390157) = 0,4347539 \quad (b2),$$

$$K_3 = 0,1.(2.1,25.1,7700696) = 0,4425174 \quad (c2),$$

$$K_4 = 0,1.(2.1,3.1,99521005) = 0,5187546 \quad (d2).$$

Substituindo os valores de (a2) até (d2) na equação (3.41) tem-se,

$$y_3 = 1,55269265 + \frac{1}{6}(0,3726462 + 2.0,4347539 + 2.0,4425174 + 0,5187546) = 1,99368321.$$

Para  $n = 3$ ,  $x_3 = 1,3$ ,  $y_3 = 1,99368321$  e  $h = 0,1$  tem-se,

$$K_1 = 0,1.(2.1,3.1,99368321) = 0,5183576 \quad (a3),$$

$$K_2 = 0,1.(2.1,35.2,2528620) = 0,6082727 \quad (b3),$$



$$K_3 = 0,1 \cdot (2 \cdot 1,35 \cdot 2,2978195) = 0,6204112 \quad (c3),$$

$$K_4 = 0,1 \cdot (2 \cdot 1,4 \cdot 2,61409449) = 0,7319464 \quad (d3).$$

Substituindo os valores de  $(a3)$  até  $(d3)$  na equação (3.41) tem-se,

$$y_4 = 1,99368321 + \frac{1}{6}(0,5183576 + 2 \cdot 0,6082727 + 2 \cdot 0,6204112 + 0,7319464) = 2,61162852.$$

Agora,  $n = 4$ ,  $x_4 = 1,4$ ,  $y_4 = 2,61162852$  e  $h = 0,1$ ,

$$K_1 = 0,1 \cdot (2 \cdot 1,4 \cdot 2,61162852) = 0,7312559 \quad (a4),$$

$$K_2 = 0,1 \cdot (2 \cdot 1,45 \cdot 2,9772565) = 0,8634043 \quad (b4),$$

$$K_3 = 0,1 \cdot (2 \cdot 1,45 \cdot 3,0433307) = 0,8825659 \quad (c4),$$

$$K_4 = 0,1 \cdot (2 \cdot 1,5 \cdot 3,49419442) = 1,0482583 \quad (d4).$$

Aplicando os valores de  $(a4)$  até  $(d4)$  na equação (3.41) tem-se,

$$y_5 = 2,61162852 + \frac{1}{6}(0,7312559 + 2 \cdot 0,8634043 + 2 \cdot 0,8825659 + 1,0482583) = 3,49020429.$$

A tabela (3.4) abaixo, apresenta os valores para o PVI (3.36):

$x_n$	Runge-Kutta 4 <sup>a</sup> ordem
1,00	1,0000000
1,10	1,2336736
1,20	1,5526926
1,30	1,9936832
1,40	2,6116285
1,50	3,4902042

Tabela 3.4: Valores de  $y' = 2xy$  encontrados pelo Método de Runge-Kutta de 4<sup>a</sup> ordem.

Na tabela (3.4) observa-se que o valor do método para  $x_0 = 1$ , coincide com  $y_0 = 1$  porque o valor do passo  $h = 0$ .

### 3.4.4 Comparação entre os Métodos de Euler ou Runge-Kutta (RK) de 1ª Ordem e de Runge-Kutta de 4ª Ordem

Antes de efetuar a comparação entre os dois métodos, é necessário encontrar os valores exatos da equação diferencial de 1ª ordem  $y' = 2xy$ . Para que isto aconteça será resolvida esta equação, que neste caso possui a forma de variáveis separáveis, então,

$$\frac{dy}{dx} = 2xy, \quad (3.43)$$

$$\frac{dy}{y} = 2xdx. \quad (3.44)$$

Integrando ambos os lados da equação (3.44) tem-se,

$$\int \frac{dy}{y} = \int 2xdx, \quad (3.45)$$

$$\ln y(x) = x^2 + C, \quad (3.46)$$

onde  $C$  é uma constante arbitrária da integração.

Aplicando  $e$  em ambos os lados da equação (3.46) tem-se,

$$y(x) = e^{(x)^2} e^C,$$

o que resulta,

$$y(x) = e^{(x)^2} C. \quad (3.47)$$

A equação (3.47) é chamada de solução geral da equação dada.

Impondo a condição inicial  $y(1) = 1$ , isto é,  $x = 1$  e  $y(x) = 1$ , encontra-se a constante arbitrária  $C$ , então,

$$1 = e^{(1)^2} C,$$

logo,

$$C = \frac{1}{e},$$

Substituindo a constante  $C$  encontrada na equação (3.47) obtém-se,

$$y(x) = \frac{e^{(x)^2}}{e}. \quad (3.48)$$

A equação (3.48) é a solução particular da equação dada [16].

Substituindo os valores dos pontos  $x_0 = 1$ ,  $x_1 = 1,1$ ,  $x_2 = 1,2$ ,  $x_3 = 1,3$ ,  $x_4 = 1,4$  e  $x_5 = 1,5$  na equação (3.48) obtêm-se os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} y(1) &= \frac{e^{(1)^2}}{e} = 1,00000, \\ y(1,1) &= \frac{e^{(1,1)^2}}{e} = 1,2336780, \\ y(1,2) &= \frac{e^{(1,2)^2}}{e} = 1,5527072, \\ y(1,3) &= \frac{e^{(1,3)^2}}{e} = 1,9937155, \\ y(1,4) &= \frac{e^{(1,4)^2}}{e} = 2,6116964, \\ y(1,5) &= \frac{e^{(1,5)^2}}{e} = 3,4903429. \end{aligned}$$

Juntado estes valores encontrados com os das tabelas (3.1) - Método de Euler ou RK de 1ª ordem, e (3.4) - Método de Runge-Kutta de 4ª ordem, obtém-se a tabela (3.5) abaixo:

$x_n$	Euler ou RK 1ª ordem	Runge-Kutta 4ª ordem	Valor Exato
1,00	1,0000	1,0000	1,0000
1,10	1,2000	1,2337	1,2337
1,20	1,4640	1,5527	1,5527
1,30	1,8154	1,9937	1,9937
1,40	2,2874	2,6116	2,6117
1,50	2,9278	3,4902	3,4903

Tabela 3.5: Comparação dos Métodos para  $y' = 2xy$ , com  $y(1) = 1$  e  $h = 0,1$

Observando os resultados obtidos, no primeiro passo constata-se um erro absoluto de 0,0337 para o Método de Euler e 0,0000 para o Runge-Kutta. Considerando a solução da tabela (3.5) acima com quatro casa decimais, caso houvessem mais casas já haveria uma margem de erro também para o Runge-Kutta de 4ª ordem, como mostra a tabela (3.4) com sete casas decimais. Para os

passos seguintes, o Runge-Kutta de 4ª ordem se mantém estável, enquanto os outros métodos tendem a aumentar o erro. Somente no passo 1,50 que haverá diferença no resultado do Runge-Kutta. Para uma melhor exatidão do método de Runge-Kutta, deve-se manter muitas casas decimais na solução numérica, para ver o efeito da redução de passo  $h$  à metade e o erro ser dividido por um fator de cerca de  $2^4 = 16$ .

Nesta pesquisa, apesar de se obter um sistema de equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem, aplica-se o método de Runge-Kutta de 4ª ordem em apenas duas das equações do sistema, enquanto que as outras têm sua solução por método algébrico.

## **3.5 Função de Distribuição das Gotas**

### **3.5.1 Função Densidade de Probabilidade dos Diâmetros Médios das Gotas**

Para sistemas de multigotículas, a função densidade dos diâmetros médios das gotas são definidos de acordo com a necessidade de aplicação. Um diâmetro médio depende, não somente, do tipo da distribuição de gotas, mas também da seleção de um fator de ponderação. Esta ponderação pode ser definida em termos de qualquer um destes itens: ou a quantidade de diâmetros das gotas ou a massa da gota com um dado tamanho [2, 3, 17].

Para esta pesquisa foi escolhida a função densidade de probabilidade em relação a amostra de diâmetros ou raios das gotas, representada por  $f_n(D)$ , onde  $n$  é a quantidade de diâmetros da gota e  $D$  é o diâmetro.

### **3.5.2 Distribuições Típicas**

Nas aplicações de fluxos de líquidos e gases, as funções de distribuição de probabilidade mais usadas para o tamanho das gotas encontradas em [2, 3, 18]

são: (a) a distribuição Gaussiana ou Normal; (b) a distribuição Log-Normal; e (c) a distribuição Rosin-Rammler. Estas três funções de distribuição são muito usadas para testar curvas com dados experimentais.

Muitos modelos de gotas finas têm a Log-Normal como distribuição dos tamanhos de suas gotículas. Isto é, com o logaritmo do tamanho das gotas, a distribuição dos tamanhos resulta na distribuição Gaussiana em escala semilogarítmica. Portanto, a função densidade para a distribuição Log-Normal é expressa por,

$$f_n(\ln D) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{Dl}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\ln D - \ln D_{0l}}{\sigma_{Dl}}\right)^2\right]. \quad (3.49)$$

Neste caso,  $D_{0l}$  é o diâmetro médio das gotas,  $\sigma_{Dl}$  é o desvio padrão do raio do diâmetro  $D$ .

Já a distribuição Rosin-Rammler é para gotículas irregulares e determina a massa da gota através de seu diâmetro e de dois parâmetros,  $\alpha$  e  $\beta$ . Sua função densidade tem a forma,

$$f_m(D) = \alpha\beta D^{\alpha-1} \exp(-\beta D^\alpha), \quad (3.50)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são constantes e  $D$  o diâmetro da gota [3].

Nesta pesquisa utiliza-se a distribuição Gaussiana ou também chamada de distribuição Normal. O motivo pelo qual optou-se por esta distribuição de probabilidade é que, pela seção (2.2) considera-se que a gota é esférica, com isto a distribuição Rosin-Rammler já não nos interessaria e a distribuição Log-Normal trabalha, em certos casos, com diâmetros negativos e sempre em escalas logarítmicas, não permitindo a visualização real do diâmetro pelo usuário, o que não acontece na Gaussiana, pois os diâmetros estão sempre na escala de  $\mu m$ .

### 3.5.3 Distribuição de Probabilidade Gaussiana ou Normal

A Distribuição de Probabilidade Gaussiana ou Normal, tem com função den-

sidade [2, 3, 17]

$$f_n(D) = A_n \exp\left(-\frac{(D - D_0)^2}{2\sigma_D^2}\right), \quad (3.51)$$

onde  $A_n$  é a constante de normalização<sup>2</sup> igual à  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_D}$ ,  $D$  é o diâmetro da gota,  $D_0$  é o diâmetro médio da gota, e  $\sigma_D$  é o desvio padrão da amostra de  $D$  dado por  $\sqrt{\frac{\sum(D-D_0)^2}{n-1}}$ , com isto pode-se escrever a função de distribuição da seguinte maneira

$$f_n(D) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_D} \exp\left(-\frac{(D - D_0)^2}{2\sigma_D^2}\right). \quad (3.52)$$

Uma demonstração da distribuição de amostras de raios ou diâmetros utilizando a equação (3.52) da distribuição normal está apresentada a seguir no exemplo (3.4)

Exemplo (3.4): Os dados da tabela (3.6) e do gráfico (3.6) a seguir, foram elaborados para um raio médio de 0,0012 m ou 120  $\mu m$  e uma amostra normal envolvendo 12 valores de raios ou diâmetros.

O desvio padrão calculado foi de 34,52 e a variância foi de 1191,67 com média igual a 120.

A curva é simétrica e pode-se afirmar que o intervalo  $(\bar{x} - \sigma; \bar{x} + \sigma)$  contém aproximadamente 68% dos dados da amostra.

---

<sup>2</sup>Anal. Mat.: Fator de multiplicação que faz o valor da integral de certas funções igual à unidade.

Tabela 3.6: Amostra dos Valores dos Raios das Gotas

Raio em $m$	Quantidade
0,00065	325
0,00075	494
0,00085	691
0,00095	889
0,00105	1052
0,00115	1144
0,00125	1144
0,00135	1052
0,00145	889
0,00155	691
0,00165	494
0,00175	325

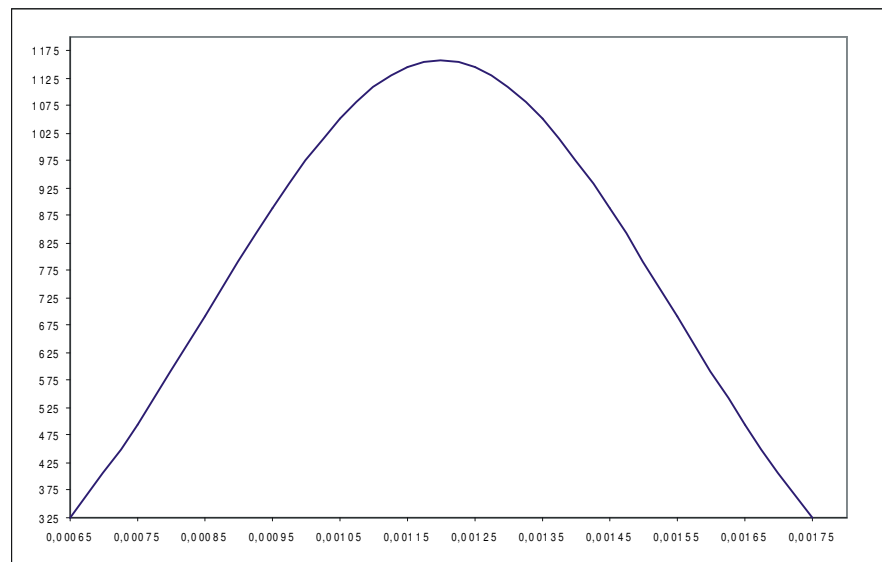


Figura 3.6: Gráfico da Distribuição Gaussiana das Gotas

## Capítulo 4

# A Modelagem Matemática

A criação de modelos para interpretar os fenômenos naturais e sociais é inerente ao ser humano. A própria noção de modelo está presente em quase todas as áreas: Arte, Moda, Arquitetura, História, Economia, Literatura, Matemática.

No entender de Granger [19], o modelo é uma imagem que se forma na mente, no momento em que o espírito racional busca compreender e expressar de forma intuitiva uma sensação, procurando relacioná-la com algo já conhecido, efetuando deduções. Nesse sentido, a modelagem, arte de modelar, é um processo que emerge da própria razão e participa da nossa vida como forma de constituição e de expressão do conhecimento.

### 4.1 O que é Modelo Matemático?

Muitas situações do mundo real podem apresentar problemas que requeiram soluções e decisões. Alguns desses problemas contêm fatos matemáticos relativamente simples, envolvendo uma matemática elementar como por exemplo, os juros cobrados por uma instituição financeira em um empréstimo ou a melhor forma para a redução do retardo num processo de industrialização. Seja qual for o caso, a resolução de um problema, em geral quando quantificado, requer uma formulação matemática detalhada. Nessa perspectiva, um conjunto de símbolos e relações matemáticas que procura traduzir, de alguma forma,



um fenômeno em questão ou problema de situação real, denomina-se "modelo matemático" [20].

Na ciência, a noção de modelo é fundamental. Em especial a Matemática, com sua arquitetura, permite a elaboração de modelos matemáticos, possibilitando uma melhor compreensão, simulação e previsão do fenômeno estudado.

Um modelo pode ser formulado em termos familiares, utilizando-se expressões numéricas ou fórmulas, diagramas, gráficos ou representações geométricas, equações algébricas, tabelas, programas computacionais, etc. Por outro lado, quando se propõe um modelo, ele é proveniente de aproximações realizadas para se poder entender melhor um fenômeno e nem sempre tais aproximações condizem com a realidade. Seja como for, um modelo matemático retrata, ainda que em uma visão simplificada, aspectos da situação pesquisada [20].

## 4.2 O que é Modelagem Matemática?

A modelagem matemática é o processo que envolve a obtenção de um modelo. Este, sob certa ótica, pode ser considerado um processo artístico, visto que, para se elaborar um modelo, além de conhecimento apurado de matemática, o modelador deve ter uma dose significativa de intuição e criatividade para interpretar o contexto, saber discernir que conteúdo matemático melhor se adapta e também ter senso crítico para jogar com as variáveis envolvidas [20].

A modelagem matemática é, assim, uma arte, ao formular, resolver e elaborar expressões que valham não apenas para uma solução particular, mas que também sirvam posteriormente, como suporte para outras aplicações e teorias.

Pode-se dizer, de forma comum, que a matemática e realidade são conjuntos disjuntos e a modelagem é um meio de interagir. A interação, que permite representar uma situação real com ferramentas matemáticas, envolve certos

procedimentos.

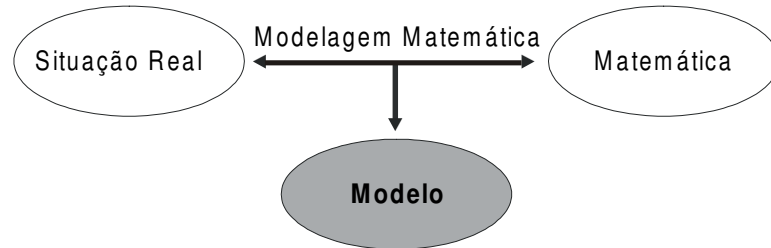


Figura 4.1: Esquema do processo de modelagem matemática.  
[20]

#### 4.2.1 Procedimentos para Elaborar uma Modelagem

Esses procedimentos podem ser agrupados em três etapas:

- Interação
  - ◊ reconhecimento da situação-problema;
  - ◊ familiarização com o assunto a ser modelado à pesquisa.
- Matematização<sup>1</sup>
  - ◊ formulação do problema → hipótese;
  - ◊ resolução do problema em termos do modelo.
- Modelo matemático
  - ◊ interpretação da solução;
  - ◊ validação do modelo → uso.

##### a) Interação

---

<sup>1</sup>É a sistematização matemática.

Uma vez delineada a situação que se pretende estudar, deve ser feita uma pesquisa sobre o assunto de modo indireto (por meio de livros e revistas especializadas, entre outros) ou direto por meio de experiência em campo, de dados experimentais obtidos junto a especialistas da área.

Embora esta etapa esteja subdividida em duas, não obedece a uma ordem rígida nem tampouco se finda ao passar para a etapa seguinte. A situação-problema torna-se cada vez mais clara, à medida que se vai interagindo com os dados.

### **b) Matemática**

Esta etapa, a mais complexa e desafiante, em geral, subdividi-se em formulação e resolução. É aqui que se dá a "tradução" da situação-problema para a linguagem matemática. Intuição, criatividade e experiência acumulada são elementos indispensáveis neste processo.

É especialmente importante: (i) classificar as informações; (ii) decidir quais os fatores a serem perseguidos, levantando hipóteses; (iii) identificar constantes envolvidas; (iv) generalizar e selecionar variáveis relevantes; (v) selecionar símbolos apropriados para essas variáveis; e (vi) descrever essas relações em termos matemáticos.

O objetivo principal desta etapa é chegar a um conjunto de expressões aritméticas e fórmulas, ou equações algébricas, ou gráfico, ou representações, ou programa computacional, que levem à solução ou permitam a dedução de uma solução.

Uma vez formulada a situação-problema, passa-se à resolução ou análise com as ferramentas matemáticas de que se dispõe. Isto requer aguçado conhecimento sobre as entidades matemáticas usadas na formulação. O computador pode ser um instrumento imprescindível, especialmente em situações onde não é possível resolver por processos contínuos, mas sim, por métodos aproximados.

### c) Modelo Matemático

Para concluir o modelo, torna-se necessária uma checagem para verificar em que nível ele se aproxima da situação-problema representada e, a partir daí, verificar também o grau de confiabilidade na sua utilização. Desta forma, faz-se a interpretação do modelo, analisando as implicações da solução derivada daquele que está sendo investigado e a verificação de quão significativa e relevante é a solução (validação).

Se o modelo não atender às necessidades que o geraram, o processo deve ser retomado na segunda etapa e mudando ou ajustando hipóteses, variáveis, etc. É importante, ao concluir o modelo, a elaboração de um relatório que registre todas as facetas do desenvolvimento, a fim de propiciar seu uso de forma adequada.

O diagrama abaixo representa o processo:

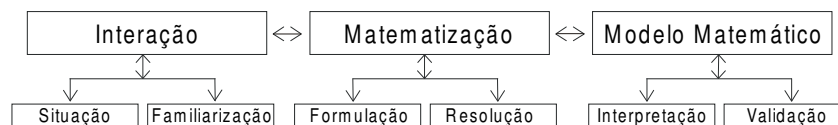


Figura 4.2: Dinâmica da modelagem matemática.

[20]

## Capítulo 5

# Modelo do Sistema Multicomponente

Para o modelo desta pesquisa, assume-se que a câmara contém combustível líquido na forma de "spray" e ar com certa umidade. O volume da câmara é calculado de forma que tenha ar em quantidade estequiométrica<sup>1</sup> para a combustão completa. A umidade relativa tende a aumentar no decorrer do processo e, quando chega a 100% o ar fica saturado de vapor d'água e passa a ocorrer condensação do mesmo, formando água líquida. Como a vaporização é um fenômeno endotérmico, a temperatura da câmara decresce, podendo atingir valores abaixo de 0° C. Neste caso, passa a haver congelamento da água condensada, formando gelo. Tanto a condensação quanto a fusão são fenômenos exotérmicos, logo abrandam a queda de temperatura.

O combustível é formado por uma mistura cuja composição é definida pelo usuário. Em seu estágio atual, o modelo considera que os diversos compostos evaporam à mesma taxa, logo suas concentrações permanecem constantes. Devido a isto a densidade do combustível também é considerada constante.

A mistura é injetada na câmara por um bico injetor que promove uma distribuição gaussiana de raios de gotículas em torno de um raio médio fornecido pelo usuário. Outras informações como a quantidade de raios ou diâmetros,

---

<sup>1</sup>Proporções dos elementos que se combinam ou dos compostos que reagem.

tempo de simulação, pressão inicial, temperatura inicial, umidade inicial e fração mássica dos compostos também são dados de entrada.

Os compostos selecionados para esta pesquisa são: o Benzeno, Ciclopentano, Decano, MTBE (Metil Terc Butil Eter), Metanol, Octano e Tolueno. Os valores constantes respectivos de cada composto, utilizados na pesquisa, encontram-se no Apêndice A - tabelas (A.1, A.2, A.3, A.4).

## 5.1 Simbologia

Para um melhor entendimento do modelo, será usada a seguinte simbologia:

$c_p$  - calor específico do estado gasoso - cal/(g.K);

$c_{p_{gsl}}$  - calor específico da gasolina - cal/(g.K);

$D_{ij}$  - difusividade mássica do composto  $i$  na gotícula  $j$  - (cm<sup>2</sup>/s);

$h_{tc}$  - coeficiente de transferência de calor - (cal/(s.cm<sup>2</sup>.K))

$m_g$  - massa do estado gasoso - (g);

$m_{ij}$  - massa do composto  $i$  na gotícula  $j$  - (g);

$m_{H_2O}^v$  - massa de vapor de água - (g);

$M_i$  - massa molar do composto  $i$  - (g/mol);

$M_{H_2O}$  - massa molar da água - (g/mol);

$n_j$  - quantidade de gotículas de raio inicial  $r_{0j}$ ;

$N_T$  - número total de mols (vapor de água + gasolina) - (mol)

$N_i$  - número de mols do composto  $i$  - (mol)

$P$  - pressão total do sistema - (atm);

$P_i$  - pressão parcial do composto  $i$  - (atm);

$P_i^v$  - pressão de vapor do composto  $i$  - (atm);

$P_{H_2O}^v$  - pressão de vapor de água - (atm);

$P_{H_2O}$  - pressão da água - (atm);

$r_{0j}$  - raio inicial da gotícula - (cm);

$R$  - constante dos gases ideais, igual a  $0,08206 \text{ l.atm/mol.K}$ ;

$t$  - tempo - (s)

$T_g$  - temperatura do estado gasoso - (K);

$T_j$  - temperatura das gotículas de raio inicial  $r_{0j}$  - (K);

$T_0$  - temperatura inicial - (K);

$U$  - Umidade Inicial - (%)

$V_{0j}$  - volume inicial das gotículas - ( $\text{cm}^3$ );

$V$  - volume da câmara - ( $\text{cm}^3$ );

$V_{tg}$  - volume total de gotículas - ( $\text{cm}^3$ );

$y_{H_2O}$  - fração volumétrica da água;

$\eta_j$  - raio adimensional;

$\lambda_{H_2O}$  - calor de vaporização da água - (cal/g);

$\lambda_i$  - calor de vaporização do composto  $i$  - (cal/g);

$\rho$  - densidade do estado gasoso - ( $\text{g/cm}^3$ );

$\rho_{gsl}$  - densidade da gasolina - ( $\text{g/cm}^3$ ).

## 5.2 A Quantidade de Equações Diferenciais Necessárias no Modelo

Para um modelo multicomponente, Kuo [2] determina que o número de equações diferenciais seja dado por  $m + 6$  equações, onde  $m$  é a quantidade de espécies (compostos) na mistura e o número 6 representa as incógnitas do sistema. Neste caso o diâmetro ou raio da gota é calculado e avaliado para apenas uma gota.

Para a nossa pesquisa, o número de equações diferenciais do sistema é dado por  $2n + m + 4$  equações, com  $n$  sendo a quantidade de raios ou diâmetros multiplicado por dois, para determinar as equações da temperatura da gota  $T_j$  e a temperatura do gás  $T_g$  e  $m$  o número de compostos. O sistema terá  $m + 4$

incógnitas do sistema, sendo elas a fração mássica  $Y_1, Y_2, \dots, Y_m$ , a pressão  $P$ , temperatura  $T$  e a umidade  $U$ . Por exemplo, se estivesse sendo analisando para apenas uma gota e um composto o resultado seria  $2 \cdot 1 + 1 + 4 = 7$  equações diferenciais iniciais, as quais são determinadas na pesquisa. Este número será chamado nesta pesquisa de *nequ*.

### 5.3 Quantidade de Iterações e Intervalo de Integração

A quantidade de iterações é a quantidade de passos que serão dados pela coordenada  $x$  na aproximação efetuada pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Para o cálculo da quantidade de iterações, utiliza-se a equação encontrada em [21], dada por

$$npi = \frac{250000}{nequ} \quad (5.1)$$

onde 250000 foi arbitrado para que exista uma melhor precisão nos cálculos.

Já, o intervalo de integração é o passo  $h$  (seção 3.4) do método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Este valor será bem pequeno como previsto no método e sua aproximação será bem próxima da solução real. A equação em [21] é dada por

$$h = \frac{tfs}{npi - 1} \quad (5.2)$$

onde  $tfs$  é o tempo de simulação fornecido como dado de entrada no sistema e  $npi$  a quantidade de iterações dada pela equação (5.1).

### 5.4 Equações Auxiliares

A seguir, serão apresentadas as equações que fornecerão resultados iniciais, os quais, serão utilizados posteriormente pelas equações diferenciais ordinárias de 1ª ordem.



### 5.4.1 Cálculo dos Raios Iniciais das Gotículas

Lefebvre [17] comenta que em processos físicos que envolviam atomizadores<sup>2</sup> onde não se conhecia o formato do bico injetor dos mesmos, a maioria dos estudos da distribuição do tamanho das gotículas produzidas por estes atomizadores era feita de forma empírica.

No entanto, atualmente têm-se produzido um grande grupo de informações úteis contendo as propriedades das fases líquida e gasosa e as dimensões dos bicos injetores geradores das dimensões da gotícula.

Nesta pesquisa são desconsiderados o formato e a dimensão do bico injetor, com isto pode-se utilizar a equação apresentada por Sirignano [21] que determina a vaporização para qualquer tipo de atomizador. A equação possui a seguinte forma,

$$r_{0j} = \left( \frac{n}{2} + j - 0,5 \right) \frac{\overline{r}_0}{n}, \quad (5.3)$$

onde  $n$  é o número de raios das gotas e  $\overline{r}_0$  é o raio médio inicial fornecidos pelo usuário.

### 5.4.2 Distribuição Gaussiana ou Normal das Gotas

O raio médio fornecido pelo usuário é empregado como uma semente para gerar uma amostra da quantidade de gotas para cada raio. Utilizando a equação (3.52) pode-se reescrevê-la em função dos raios,

$$f(r) = n_j = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_r} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{r_{0j} - \overline{r}_0}{\sigma_r} \right)^2 \right], \quad (5.4)$$

com  $\sigma_r = \sqrt{\frac{(r_{0j} - \overline{r}_0)^2}{n}}$ , onde  $n$  é o número de raios ou diâmetros fornecido pelo usuário, ou  $\sigma_r = \sqrt{\frac{(r_{0j} - \overline{r}_0)^2}{n-1}}$  caso o número da amostra de raios fornecido for inferior que 30 elementos.

---

<sup>2</sup>Atomizadores, também conhecidos como "Sprays".

### 5.4.3 Cálculo dos Volumes Iniciais das Gotículas

O volume inicial de cada gotícula  $j$  é dado pela equação do volume de uma esfera:

$$V_{0j} = \frac{4}{3}\pi r_{0j}^3. \quad (5.5)$$

### 5.4.4 Massa de uma Gotícula

A massa de uma gotícula é dada por

$$m = \rho V, \quad (5.6)$$

com  $\rho$  sendo a densidade e  $V$  o volume. Como  $V = \frac{4}{3}\pi r^3$ , então

$$m = \frac{4}{3}\pi r^3 \rho, \quad (5.7)$$

ou pode-se deixar em função do diâmetro, substituindo  $r$  por  $D/2$  na equação (5.7) obtendo,

$$\begin{aligned} m &= \frac{4}{3}\pi \left(\frac{D}{2}\right)^3 \rho, \\ m &= \frac{4}{3}\pi \frac{D^3}{8} \rho \end{aligned}$$

e simplificando,

$$m = \frac{\pi}{6} \rho D^3. \quad (5.8)$$

### 5.4.5 Número de Mols

A quantidade de mols do composto  $i$ , representado por  $N_i$  é dada por [8]

$$N_i = \frac{m_i}{M_i}, \quad (5.9)$$

onde  $m_i$  é a massa do composto  $i$  em (g) e  $M_i$  é a massa molar do composto  $i$  em (g/mol).

### 5.4.6 Cálculo da Densidade do Gás

A exemplo da equação (5.6), a densidade pode ser escrita na forma  $\rho = \frac{m}{V}$ . Mas, como na antecâmara de combustão considera-se um gás ideal, pode-se escrever a densidade pela equação dos Gases Ideais (seção B.15), então

$$\begin{aligned} PV &= NRT, \\ PV &= \frac{m}{M}RT, \\ PM &= \frac{m}{V}RT, \\ \frac{m}{V} &= \frac{PM}{RT}. \end{aligned}$$

com isto, a equação obtida pode ser escrita desta forma

$$\rho = \frac{PM_g}{RT_g}, \quad (5.10)$$

onde  $M_g$  é a massa molar do estado gasoso e é dada por [21]

$$M_g = M_{ar} + (18 - M_{ar}) \frac{P_{H_2O}}{P} + \sum_{i=1}^m \frac{P_i}{P} (M_i - M_{ar}), \quad (5.11)$$

sendo  $m$  o número de compostos da mistura,  $M_{ar}$  a massa molar do ar (constante e igual a 16 g/mol),  $P$  a pressão total,  $P_{H_2O}$  a pressão parcial da água,  $P_i$  a pressão parcial do composto  $i$  e  $M_i$  a massa molar do composto  $i$  apresentada no Apêndice A - tabela (A.1).

### 5.4.7 Pressão Parcial dos Compostos

A pressão parcial dos compostos é obtida através da equação dos Gases Ideais (seção B.15).

$$P_i = \frac{N_i RT_0}{V_{tg}}, \quad (5.12)$$

com  $N_i$  o número de mols do composto  $i$  (equação 5.9),  $R$  a constante dos gases ideais,  $T_0$  a temperatura inicial em Kelvin ( $K$ ) e  $V_{tg}$  o volume total das gotas em litros  $l$ .

### 5.4.8 Pressão Parcial da Água

Para a pressão parcial da água, utilizar-se-á a equação encontrada em [21] da seguinte forma,

$$P_{H_2O} = \frac{UP_{H_2O}^v}{100}, \quad (5.13)$$

que é a pressão parcial da água em relação a porcentagem de umidade inicial  $U$  e a pressão de vapor de água  $P_{H_2O}^v$ .

### 5.4.9 Difusividades Mássicas

Kou [2] e Fan [3] definem que, se considerarmos um gás ideal contendo duas moléculas de espécie  $A$  e  $A^*$ , ambas possuindo uma massa  $m_A$  de mesmo tamanho e forma, a velocidade molecular relativa de um fluido de velocidade  $v$  tem magnitude média  $\bar{u}$ .

$$\bar{u} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_A}}. \quad (5.14)$$

Sua unidade é  $cm/s$  e  $k$  é a constante de Boltzmann<sup>3</sup>,  $T$  a temperatura em *Kelvin* ( $K$ ) e  $m_A$  a massa da espécie  $A$  em  $g$ .

Pela teoria cinética [2, 22] o livre caminho médio <sup>4</sup> $l$  pode ser escrito como

$$l = \frac{1}{\sqrt{2}\pi D^2 \bar{n}}, \quad (5.15)$$

onde  $D$  é o diâmetro e  $\bar{n}$  é a quantidade de moléculas por unidade de volume.

A freqüência da colisão molecular, representada por  $Z$  [2, 3, 22], em uma superfície estacionária exposta pelo gás, por unidade de área, é

$$Z = \frac{1}{4} \bar{n} \bar{u}. \quad (5.16)$$

---

<sup>3</sup>Boltzmann = (constante universal do gases) / (número de Avogrado) ou  $1,3805 \cdot 10^{-16} \text{ erg}/(\text{mol}K)$

<sup>4</sup>Livre Caminho Médio  $l$  é a distância percorrida pela gotícula até sua colisão molecular.

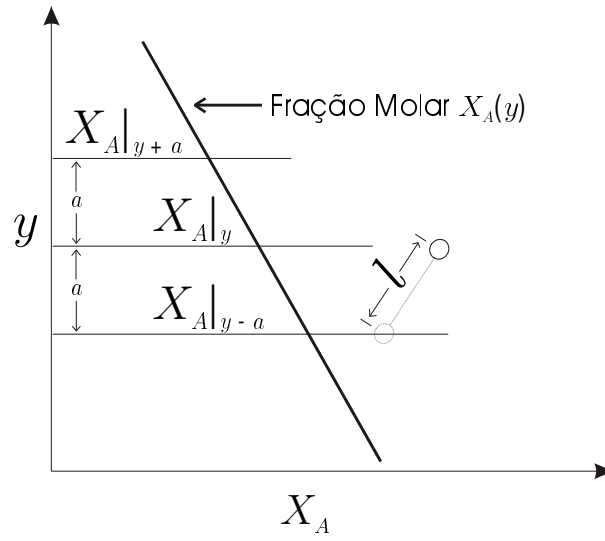


Figura 5.1: Transporte Molecular de uma espécie  $A$  de  $y - a$  até  $y$ .  
[2]

As moléculas em qualquer plano de gás (figura 5.1), têm em média, sua última colisão a uma distância  $a$ , dada pela equação:

$$a = \frac{2}{3}l. \quad (5.17)$$

Pela **Lei de Fick's da Difusão** [2, 3, 22], o fluxo molar relativo  $J_A^*$  de uma espécie  $A$  que cruza um plano de gás (figura 5.1), é dado pela quantidade de moléculas de  $A$  que cruzam este plano, por unidade de área, na direção positiva de  $y$ , menos o número de moléculas que cruzam na direção negativa de  $y$ . Então

$$J_A^* = \frac{ZX_A|_{y-a} - ZX_A|_{y+a}}{\bar{N}}, \quad (5.18)$$

se a concentração  $X_A(y) = C_A/C$  assumir o perfil essencialmente linear. Na equação (5.18)  $\bar{N}$  é o número de Avogrado.

Com esta conseqüência, pode-se assumir que

$$\frac{dX_A}{dy} = \frac{X_A|_y - X_A|_{y-a}}{a} = \frac{X_A|_{y+a} - X_A|_y}{a},$$

isolando  $X_A|_{y-a}$  e  $X_A|_{y+a}$  e substituindo  $a$  por  $\frac{2}{3}l$  tem-se

$$X_A|_{y-a} = X_A|_y - \frac{2}{3}l \frac{dX_A}{dy}, \quad (5.19)$$

$$X_A|_{y+a} = X_A|_y + \frac{2}{3} l \frac{dX_A}{dy}. \quad (5.20)$$

Substituindo as equações (5.19) e (5.20) na equação (5.18), tem-se

$$J_A^* = \frac{Z}{N} \left( X_A|_y - \frac{2}{3} l \frac{dX_A}{dy} - \left( X_A|_y + \frac{2}{3} l \frac{dX_A}{dy} \right) \right), \quad (5.21)$$

simplificando, tem-se

$$J_A^* = \frac{Z}{N} \left( -\frac{4}{3} l \frac{dX_A}{dy} \right), \quad (5.22)$$

e substituindo  $Z$  pela equação (5.16), fica

$$J_A^* = - \left( \left( \frac{1}{3} \frac{\bar{n}}{N} \bar{u} l \right) \frac{dX_A}{dy} \right). \quad (5.23)$$

A concentração molar  $C$  pode ser dada por  $C = \frac{\bar{n}}{V}$  que é o número de mols por unidade de volume, ou por  $C = \frac{p}{RT}$  ou ainda por  $C = \frac{\bar{n}}{N}$ . Com isto, substituindo na equação (5.23), tem-se

$$J_A^* = -C \left( \left( \frac{1}{3} \bar{u} l \right) \frac{dX_A}{dy} \right), \quad (5.24)$$

que em termos do fluxo molar representa a **Primeira Lei de Fick's** para a componente  $y$ . Comparando com a sua forma geral,

$$J_A^* = -C D_{AA^*} \nabla A, \quad (5.25)$$

então o valor da difusividade mássica entre duas moléculas de espécies  $A$  e  $A^*$ ,  $D_{AA^*}$  é

$$D_{A^*A} = \frac{1}{3} \bar{u} l. \quad (5.26)$$

Substituindo  $\bar{u}$  pela equação (5.14) e  $l$  pela equação (5.15), obtém-se

$$D_{AA^*} = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_A}} \frac{1}{\sqrt{2\pi D^2 \bar{n}}}. \quad (5.27)$$

Multiplicando o numerador e o denominador por  $kT$  e arranjando a equação (5.27), tem-se

$$D_{AA^*} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{k^3}{\pi^3 m_A}} \frac{T^{3/2}}{D^2} \frac{1}{\bar{n}kT}. \quad (5.28)$$

Usando a lei dos gases ideais onde  $p = CRT = \bar{n}kT$ ,

$$D_{AA^*} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{k^3}{\pi^3 m_A}} \frac{T^{3/2}}{PD^2}, \quad (5.29)$$

que é a difusividade mássica de misturas de esferas rígidas de idênticas massa e diâmetro [2, 3], assumindo a forma

$$D_{ij} = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{k^3}{\pi^3 m_i}} \frac{T^{3/2}}{P(2r_{0j})^2}. \quad (5.30)$$

nesta pesquisa.

#### 5.4.10 Cálculo do Coeficiente de Transferência de Calor

Em Sirignano [21] a equação da transferência de calor para sistemas multi-componentes é

$$h_{tc} = [13,2 - 0,0313(370 - T_g)] \left( \frac{T_g}{370} \right)^{\left[ 2 - 0,0372 \left( \frac{T_g}{370} \right)^2 \right]}. \quad (5.31)$$

obtida experimentalmente em função da temperatura do estado gasoso.

#### 5.4.11 Cálculo dos Calores Específicos

O calor específico da mistura dos compostos é dado pela equação encontrada em [21] e tem a seguinte forma

$$c_p = 0,26 + \frac{P_{H_2O}}{P} + \sum_{i=1}^m \frac{P_i}{P} c_{p_i}, \quad (5.32)$$

onde  $c_{p_i}$  é o calor específico do composto  $i$ .

Já a equação do calor específico da gasolina é por,

$$c_{p_{gsl}} = \sum_{i=1}^m \tau_i c_{p_i}, \quad (5.33)$$

onde  $\tau_i$  é a fração mássica do composto  $i$ .

### 5.4.12 Cálculo do Volume da Câmara

É o mesmo volume ocupado pelo ar necessário à combustão completa das gotas e é dado por [21],

$$V = V_0 \left( 1 + \frac{U P_{H_2O}}{100 P} \right). \quad (5.34)$$

Com  $V_0 = \frac{m_{gst} R T_0}{P_{0,21}} \sum_{i=1}^m e_i \frac{\tau_i}{M_i}$ , onde  $m_{gst}$  é a massa da gasolina na câmara,  $T_0$  é a temperatura inicial e  $e_i$  é o coeficiente estequiométrico<sup>5</sup> do composto  $i$ .

### 5.4.13 Raio Adimensional

Para dar maior estabilidade ao método numérico, emprega-se o raio adimensional  $\eta$ , que assumirá valores entre 0 e 1 e é dado por

$$\eta_j = \left( \frac{r_j}{r_{0j}} \right)^2. \quad (5.35)$$

Isolando  $r_j$ ,

$$r_j = (\eta_j)^{1/2} r_{0j}. \quad (5.36)$$

Para o instante inicial, considera-se  $\eta_j = 1$ .

### 5.4.14 Cálculo da Massa do Estado Gasoso

A massa do estado gasoso, representada por  $m_g$  é calculada pela soma das massas do ar ( $m_{ar}$ ), a de vapor da água ( $m_{H_2O}^v$ ) e a de combustível evaporado [21].

$$m_g = m_{ar} + m_{H_2O}^v + \sum_{j=1}^m n_j m_j. \quad (5.37)$$

---

<sup>5</sup>Mesmo que número de mols.



Como  $m_j = \rho_{gsl} V_j$  e  $V_j = \frac{4}{3}\pi r_j^3$ , a equação fica

$$m_g = m_{ar} + m_{H_2O}^v + \frac{4}{3}\pi\rho_{gsl} \sum_{j=1}^m n_j r_j^3. \quad (5.38)$$

Nesta equação,  $n_j$  é a quantidade de raios da gota  $j$  e  $r_j$  é o raio adimensional.

Com a massa de ar,  $m_{ar}$ , dada pela lei dos gases ideais,

$$m_{ar} = \frac{PVM_{ar}}{RT_g}, \quad (5.39)$$

onde  $M_{ar}$  é a massa molar do ar.

#### 5.4.15 Cálculo das Pressões de Vapor

Existem diversas equações para se calcular a pressão de vapor de um composto. Para esta pesquisa foi selecionada a equação de Antoine baseada nos estudos de Poling, Prausnitz e O'Connell [23],

$$\ln P_i^v = A - \frac{B}{T + C}, \quad (5.40)$$

onde os coeficientes  $A$ ,  $B$  e  $C$  são as constantes de Antoine para gases ideais, particulares a cada composto apresentadas na tabela (A.2) e  $T$  é a temperatura em  $^{\circ}C$ .

Para o cálculo da pressão do vapor de água, utiliza-se a mesma equação

$$\ln P_{H_2O}^v = A - \frac{B}{T + C}. \quad (5.41)$$

### 5.5 As Equações Diferenciais do Sistema

#### 5.5.1 Balanço de Massa na Gotícula

Considerando-se a entrada de ar e saída dos componentes na gotícula, pode-se determinar o balanço de massa na mesma. Considera-se também a 1ª

**Lei de Fick's de Difusão**, que é escrita em termos do fluxo de difusão molar  $J_A^*$  de uma espécie  $A$  difusa na direção decrescente da fração molar  $A$  por causa dos fluxos de calor conduzidos em direção decrescentes da temperatura.

As equações são expressas da seguintes forma [2, 3],

$$J_A = -r D_{AB} \nabla Y_A, \quad (5.42)$$

que é o fluxo mássico e

$$J_A^* = -C D_{AB} \nabla X_A. \quad (5.43)$$

o fluxo molar.

O fluxo mássico  $A$  relativo às coordenadas estacionárias apresentado em [1, 2, 3] é dado por,

$$\dot{m}_A = \rho_A v - \rho D_{AB} Y_A, \quad (5.44)$$

onde  $\rho_A v$  é o fluxo mássico relativo à mistura e  $-\rho D_{AB} Y_A$  é relativo ao ponto.

Então, considera-se uma gota com certo raio  ${}^6r_s$ . Se a gota é vaporizada, então o fluido vai deixar a superfície por convecção e difusão. Desde que, abaixo da superfície da gota, só exista combustível ( $F$ ), o total de taxa de fluxo mássico até a superfície é igual a soma do fluxo mássico devido a convecção e difusão. Com isto, pode-se escrever

$$\rho_s v_s = \rho_s (Y_F)_s v_s + \left( -\rho_s D_{AB} \left( \frac{dY_F}{dr} \right)_s \right), \quad (5.45)$$

onde  $\rho_s v_s$  é o fluxo mássico total de gases do combustível deixando a superfície,  $\rho_s (Y_F)_s v_s$  o fluxo mássico do combustível devido a grande velocidade da mistura na superfície e  $\left( -\rho_s D_{AB} \left( \frac{dY_F}{dr} \right)_s \right)$  o fluxo mássico devido à difusão mássica.  $Y_F$  é a fração mássica do combustível ( $F$ ) até a posição  $r$ ,  $\rho$  é a densidade,  $v$  a velocidade do fluxo e  $D_{AB}$  a difusividade mássica.

---

<sup>6</sup>Raio da gota até a superfície.

Isolando  $v_s$ , tem-se

$$\begin{aligned}\rho_s v_s - \rho_s (Y_F)_s v_s &= -\rho_s D_{AB} \left( \frac{dY_F}{dr} \right)_s, \\ v_s (\rho_s - \rho_s (Y_F)_s) &= -\rho_s D_{AB} \left( \frac{dY_F}{dr} \right)_s, \\ v_s [\rho_s (1 - (Y_F)_s)] &= -\rho_s D_{AB} \left( \frac{dY_F}{dr} \right)_s, \\ v_s &= \frac{-\rho_s D_{AB} \left( \frac{dY_F}{dr} \right)_s}{\rho_s (1 - (Y_F)_s)},\end{aligned}$$

simplificando os  $\rho_s$  e passando o sinal negativo para o denominador, tem-se

$$v_s = \frac{D_{AB} \left( \frac{dY_F}{dr} \right)_s}{(Y_F)_s - 1}. \quad (5.46)$$

Spalding [24] define o parâmetro  $b$  como sendo

$$b \equiv \frac{Y_F}{Y_{Fs} - 1} \equiv - \frac{\text{fração mássica de } F \text{ até } r}{\text{fração mássica do composto até a superfície } r_s}. \quad (5.47)$$

Então  $v_s$  fica

$$v_s = D \left( \frac{db}{dr} \right)_s. \quad (5.48)$$

A equação de conservação da espécie  $i$ , dada por [1, 2, 18], é escrita como sendo

$$\frac{d}{dr} \left[ r^2 \left( \rho v Y_i - \rho D \frac{dY_i}{dr} \right) \right] = 0. \quad (5.49)$$

Arranjando, tem-se

$$r^2 \rho v \frac{db}{dr} = \frac{d}{dr} \left( r^2 \rho D \frac{db}{dr} \right). \quad (5.50)$$

A condição de contorno até  $r = \infty$  é  $Y_F = Y_{F\infty}$ , ou

$$b = b_\infty = \frac{Y_{F\infty}}{Y_{Fs} - 1}. \quad (5.51)$$

Em Faeth [1] a integração da equação da continuidade determina que

$$r^2 \rho v = \text{constante} = r_s^2 \rho_s v_s. \quad (5.52)$$

Integrando a equação (5.50) obtém-se,

$$\begin{aligned} \int r^2 \rho v db &= \int \frac{d}{dr} \left( r^2 \rho D \frac{db}{dr} \right) dr, \\ r^2 \rho v b &= r^2 \rho D \frac{db}{dr} + \text{Constante}, \end{aligned} \quad (5.53)$$

substituindo  $D \frac{db}{dr}$  por  $v_s$  e encontrando a constante

$$\begin{aligned} r_s^2 \rho_s v_s b_s &= r_s^2 \rho_s v_s + \text{Constante}, \\ \text{Constante} &= r_s^2 \rho_s v_s b_s - r_s^2 \rho_s v_s, \\ \text{Constante} &= r_s^2 \rho_s v_s (b_s - 1). \end{aligned} \quad (5.54)$$

Agora, substituindo a constante (5.54) na equação (5.53) e usando a relação da (5.52), obtém-se

$$\begin{aligned} r_s^2 \rho_s v_s b &= r^2 \rho D \frac{db}{dr} + r_s^2 \rho_s v_s (b_s - 1) \\ r_s^2 \rho_s v_s b - r_s^2 \rho_s v_s (b_s - 1) &= r^2 \rho D \frac{db}{dr} \\ r_s^2 \rho_s v_s (b - b_s + 1) &= r^2 \rho D \frac{db}{dr}, \end{aligned} \quad (5.55)$$

e separando as variáveis,

$$\frac{r_s^2 \rho_s v_s}{r^2 \rho D} dr = \frac{db}{(b - b_s + 1)}. \quad (5.56)$$

Substituindo o produto constante  $\rho D$  por  $\rho_s D_s$  e em seguida integrando a equação (5.56), tem-se

$$\frac{r_s^2 v_s}{r D_s} = \ln(b - b_s + 1) + \text{Constante}. \quad (5.57)$$

Pelas condições de contorno (5.51) e como  $r = r_s$  pode-se escrever

$$\frac{r_s v_s}{D_s} = \ln[(b_\infty - b_s) + 1]. \quad (5.58)$$

A diferença  $b_\infty - b_s$  na referência [24] é chamada de **Número Spalding B de Transferência**, então

$$B \equiv b_\infty - b_s = \frac{Y_{Fs} - Y_{F\infty}}{1 - Y_{Fs}}. \quad (5.59)$$

Com isto, a equação (5.58) fica,

$$r_s v_s = D_s \ln(1 + B), \quad (5.60)$$

isolando  $v_s$ , tem-se

$$v_s = \frac{D_s \ln(1 + B)}{r_s}. \quad (5.61)$$

Portanto, o fluxo de massa por unidade de área, apresentada na equação (3.17), também chamada de  ${}^7G_F$  fica

$$\begin{aligned} G_F &= \dot{m}_F = \rho_s v_s A \\ G_F &= \frac{\dot{m}_F}{4\pi r_s^2} = \rho_s v_s, \end{aligned} \quad (5.62)$$

e substituindo a equação (5.61) na equação (5.62),

$$G_F = \frac{\dot{m}_F}{4\pi r_s^2} = \rho_s \frac{D_s \ln(1 + B)}{r_s}. \quad (5.63)$$

Para o balanço de massa da gotícula, Faeth [1] e Sirignano [21] consideram que  $\ln(1 + B) \equiv \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right)$  e a variação do balanço da massa da gotícula pelo tempo nesta pesquisa possui a forma

$$\frac{dm_j}{dt} = A_{ij} \sum_{i=1}^n K_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right), \quad (5.64)$$

onde  $A_{ij}$  é a área do composto  $i$  na gotícula  $j$  e  $K_{ij} = \frac{\rho D_{ij}}{r_j}$ .

Para auxiliar na solução do sistema, utiliza-se a equação na seguinte forma

$$\frac{dm_{ij}}{dt} = 4\pi r_{0j} \eta^{1/2} \rho D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right), \quad (5.65)$$

que é a massa do composto  $i$  na gotícula  $j$ , simplificando a equação (5.64).

---

<sup>7</sup>Velocidade mássica total por unidade de área.

### 5.5.2 1ª Equação: Variação do Raio Adimensional

Inicia-se com a equação (5.64) e escrevendo a massa da gotícula como

$m_j = \rho_{gsl} V_j$ , obtém-se

$$\rho_{gsl} \frac{dV_j}{dt} = A_{ij} \sum_{i=1}^n K_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.66)$$

Desmembrando o volume da gotícula esférica em  $V_j = \frac{4}{3}\pi r_j^3$ ,

$$\frac{4}{3}\pi \frac{dr_j^3}{dt} = \frac{A_{ij}}{\rho_{gsl}} \sum_{i=1}^n K_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right), \quad (5.67)$$

e empregando a regra da cadeia, obtém-se

$$3r_j^2 \frac{dr_j}{dt} = \frac{3A_{ij}}{4\pi\rho_{gsl}} \sum_{i=1}^n K_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.68)$$

Com  $A_{ij} = 4\pi r_j^2$ , e  $K_{ij} = \frac{\rho D_{ij}}{r_j}$  pode-se simplificar a equação da seguinte forma

$$\frac{dr_j}{dt} = \frac{\rho}{r_j \rho_{gsl}} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.69)$$

É utilizado o raio adimensional (equação 5.35) para uma melhor estabilidade no método. Então,

$$\frac{d(r_{0j}\eta_j^{1/2})}{dt} = \frac{\rho}{\rho_{gsl}r_{0j}\eta_j^{1/2}} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.70)$$

Aplicando novamente a regra da cadeia, tem-se

$$\frac{1}{2\eta_j^{1/2}} \frac{d\eta_j}{dt} = \frac{\rho}{\rho_{gsl}r_{0j}^2\eta_j^{1/2}} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.71)$$

Simplificando os  $\eta_j^{1/2}$  e arranjando a equação, finalmente obtém-se a primeira equação do sistema, que descreve a variação do raio adimensional das gotículas:

#### 1ª Equação do Sistema

$$\frac{d\eta_j}{dt} = \frac{2\rho}{\rho_{gsl}r_{0j}^2} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.72)$$

### 5.5.3 2ª Equação: Variação do Quociente entre a Pressão Parcial dos Compostos pela Temperatura do Gás

A variação da massa do componente  $i$  na fase gasosa descrita por Sirignano [21] é dada pelo seguinte balanço de massa,

$$\frac{dm_i^g}{dt} = \left(1 - \frac{P_i}{P_i^v}\right) \sum_{i=1}^n n_{ij} A_{ij} K_{ij}. \quad (5.73)$$

Considerando que a mistura gasosa na câmara se comporta como um gás ideal, pode-se fazer  $m_i^g = \frac{P_i V M_i}{R T_g}$ , obtendo

$$\frac{V M_i}{R} \frac{d}{dt} \left( \frac{P_i}{T_g} \right) = \left(1 - \frac{P_i}{P_i^v}\right) \sum_{i=1}^n n_{ij} A_{ij} K_{ij}. \quad (5.74)$$

Substituindo  $A_{ij}$  e  $K_{ij}$  e arranjando a equação, chega-se à equação que fornece a pressão de vapor para cada componente da mistura:

#### 2ª Equação do Sistema

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{P_i}{T_g} \right) = \frac{4\pi\rho D_{ij}R}{V M_i} \left(1 - \frac{P_i}{P_i^v}\right) \sum_{i=1}^n n_j r_{0j} \eta^{1/2}. \quad (5.75)$$

A condição inicial desta equação é  $\left(\frac{P_i}{T_g}\right)_{t=0} = 0$ , pois, supõe-se que anteriormente à admissão, o composto  $i$  não está presente na câmara.

### 5.5.4 3ª Equação: Variação do Número de Mols do Sistema

O número total de mols do sistema corresponde à soma do número de mols do vapor da água e do combustível evaporado e é dado por [2, 21]

$$N_T = N_{H_2O} + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n N_{ij}, \quad (5.76)$$

onde  $N_T$  é o número total de mols, igual ao  $N_{H_2O}$  número de mols do vapor da água e  $N_{ij}$  o número de mols do combustível evaporado do composto  $i$  na

gotícula  $j$ . O valor de  $m$  é o número de compostos e  $n$  é a quantidade de raios iniciais.

Como  $N_{H_2O} = \frac{m_{H_2O}^v}{M_{H_2O}}$  e  $N_{ij} = \frac{m_{ij}^g}{M_i}$ , então a equação pode ser reescrita da seguinte forma

$$N_T = \frac{m_{H_2O}^v}{M_{H_2O}} + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \frac{m_{ij}^g}{M_i}. \quad (5.77)$$

Derivando a equação (5.77) em relação ao tempo, tem-se

$$\frac{dN_T}{dt} = \frac{1}{M_{H_2O}} \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \frac{1}{M_i} \frac{dm_{ij}^g}{dt}. \quad (5.78)$$

Faeth [1] e Schmehl *et al.* [25] analisam que  $\frac{dm}{dt} = -\dot{m}$  representa uma taxa decrescente, devido ao fluxo oposto da massa. Então pode-se considerar que  $\frac{dm_{ij}^g}{dt} = -\frac{dm_{ij}}{dt}$ , logo a

### 3ª Equação do Sistema

$$\frac{dN_T}{dt} = \frac{1}{M_{H_2O}} \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \frac{1}{M_i} \frac{dm_{ij}}{dt}, \quad (5.79)$$

equação, a qual mede a variação do número de mols do vapor de água com a da gasolina evaporada.

### 5.5.5 4ª Equação: Variação da Fração Volumétrica da Água

A fração volumétrica da água é definida por [21] como sendo  $y_{H_2O} = \frac{P_{H_2O}}{P}$ , que é pressão parcial da água pela pressão total do sistema. Porém, pela equação (5.13), tem-se que

$$y_{H_2O} = \frac{U P_{H_2O}^v}{100 P}. \quad (5.80)$$

Derivando a equação (5.80) em relação ao tempo, tem-se

$$\frac{dy_{H_2O}}{dt} = \frac{U}{100 P} \frac{dP_{H_2O}^v}{dt}. \quad (5.81)$$



A fração volumétrica varia apenas a partir do momento em que a umidade relativa atinge 100% e passa a haver condensação do vapor da água. Como a umidade relativa permanece constante até o equilíbrio do sistema, pode-se simplificar a equação, resultando em

$$\frac{dy_{H_2O}}{dt} = \frac{1}{P} \frac{dP_{H_2O}^v}{dt}. \quad (5.82)$$

Reescrevendo  $\frac{dP_{H_2O}^v}{dt}$ , chega-se a equação que mede a variação da fração volumétrica da água. A variação é zero quando  $y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P}$ .

#### 4ª Equação do Sistema

$$\frac{dy_{H_2O}}{dt} = \begin{cases} \frac{1}{P} \frac{dT_g}{dt} \frac{\partial P_{H_2O}^v}{\partial T_g}, & \text{se } y_{H_2O} \geq \frac{P_{H_2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P}. \end{cases} \quad (5.83)$$

### 5.5.6 5ª Equação: Variação da Massa de Vapor de Água

A fração volumétrica da água pode ser expressada em função do número de mols,  $y_{H_2O} = \frac{N_{H_2O}}{N_T}$ . Mas como  $N_{H_2O} = \frac{m_{H_2O}^v}{M_{H_2O}}$ , tem-se

$$m_{H_2O}^v = M_{H_2O} y_{H_2O} N_T. \quad (5.84)$$

Derivando a equação (5.84) em relação ao tempo, obtém-se

$$\frac{dm_{H_2O}^v}{dt} = M_{H_2O} \left( \frac{d(y_{H_2O} N_T)}{dt} \right), \quad (5.85)$$

que pode ser reescrita, aplicando a regra da cadeia, da seguinte forma,

#### 5ª Equação do Sistema

$$\frac{dm_{H_2O}^v}{dt} = \begin{cases} M_{H_2O} \left( N_T \frac{dy_{H_2O}}{dt} + y_{H_2O} \frac{dN_T}{dt} \right), & \text{se } y_{H_2O} \geq \frac{P_{H_2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P}. \end{cases} \quad (5.86)$$

A variação é zero quando  $y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P}$ .

### 5.5.7 6ª Equação: Variação da Temperatura das Gotas

Em Fan e Zhu [3], a transferência de calor da fase gotícula para gás, pode ser obtida por experimentos que medem o tempo necessário para a gotícula sair da temperatura fria para a temperatura  $T_0$ , assim como a massa  $M$  e a área  $A$  da superfície da gotícula.

Assumindo que exista uma boa mistura dos compostos e que a temperatura da massa sólida da mistura é igual a temperatura de um gás, o balanço de energia é dado por,

$$c_{p_{gsl}} M_i dT_j = hA(T_g - T_j)dt. \quad (5.87)$$

Arranjando a equação anterior, tem-se

$$c_{p_{gsl}} M_i \frac{dT_j}{dt} = hA(T_g - T_j), \quad (5.88)$$

onde  $c_p$  é o calor específico do estado gasoso,  $m_j$  é a massa da gotícula  $j$ ,  $T_j$  é a temperatura da gotícula  $j$ ,  $T_g$  é a temperatura do gás,  $h$  é o coeficiente de transferência de calor (equação 5.31) e  $A_j$  a área da superfície da gotícula  $j$ .

Esta forma é apresentada em [3], mas para dar maior estabilidade nos processos multicomponentes, Faeth [1] e Kuo [2], subtraem desta equação a variação da massa da gotícula multiplicada pelo calor de vaporização dos compostos. Com isto obtém-se a seguinte equação,

$$\frac{d}{dt}(c_{p_{gsl}} m_j T_j) = A_j h (T_g - T_j) - \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{dm_{ij}}{dt}, \quad (5.89)$$

com  $\lambda_i$  o calor de vaporização dos compostos, cujos valores encontram-se na tabela (A.4).

Aplicando a regra da cadeia e arranjando a equação (5.89), obtém-se

$$m_j \frac{dT_j}{dt} + T_j \frac{dm_j}{dt} = A_j \frac{h}{c_{p_{gsl}}} (T_g - T_j) - \frac{1}{c_{p_{gsl}}} \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{dm_{ij}}{dt}. \quad (5.90)$$

Isolando  $\frac{dT_j}{dt}$  e substituindo  $\frac{dm_j}{dt}$  pela equação (5.64) e passando dividindo  $m_j$ , tem-se

$$\begin{aligned}\frac{dT_j}{dt} &= \frac{A_j h}{m_j c_{p_{gsl}}} (T_g - T_j) - \frac{1}{m_j c_{p_{gsl}}} \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{dm_{ij}}{dt} \\ &- \frac{T_j A_j}{m_j} \sum_{i=1}^m K_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right).\end{aligned}\quad (5.91)$$

Com  $A_j = 4\pi r_j^2$ ,  $K_{ij} = \frac{\rho D_{ij}}{r_j}$ , e  $m_j = V_j \rho_{gsl} = \frac{4}{3}\pi r_j^3 \rho_{gsl}$ , substituindo na equação (5.91), obtém-se

$$\begin{aligned}\frac{dT_j}{dt} &= \frac{h(4\pi r_j^2)}{(\frac{4}{3}\pi r_j^3 \rho_{gsl}) c_{p_{gsl}}} (T_g - T_j) - \frac{1}{\frac{4}{3}\pi r_j^3 \rho_{gsl} c_{p_{gsl}}} \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{dm_{ij}}{dt} \\ &- \frac{T_j(4\pi r_j^2)}{\frac{4}{3}\pi r_j^3 \rho_{gsl}} \sum_{i=1}^m \frac{\rho D_{ij}}{r_j} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right).\end{aligned}\quad (5.92)$$

Simplificando e arranjado a equação (5.92), tem-se

$$\begin{aligned}\frac{dT_j}{dt} &= \frac{3h}{r_j \rho_{gsl} c_{p_{gsl}}} (T_g - T_j) - \frac{3}{4\pi r_j^3 c_{p_{gsl}}} \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{dm_{ij}}{dt} \\ &- \frac{3T_j \rho}{r_j^2 \rho_{gsl}} \sum_{i=1}^m D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right).\end{aligned}\quad (5.93)$$

Aplicando o raio adimensional  $r_j = r_{oj} \eta_j^{1/2}$ , obtém-se

$$\begin{aligned}\frac{dT_j}{dt} &= \frac{3h}{r_{oj} \eta_j^{1/2} \rho_{gsl} c_{p_{gsl}}} (T_g - T_j) - \frac{3}{4\pi r_{oj}^3 \eta_j^{3/2} c_{p_{gsl}}} \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{dm_{ij}}{dt} \\ &- \frac{3T_j \rho}{r_{oj}^2 \eta_j \rho_{gsl}} \sum_{i=1}^m D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right).\end{aligned}\quad (5.94)$$

Observando o segundo membro da equação (5.94), nota-se que

$$\frac{\rho}{r_{oj}^2 \eta_j \rho_{gsl}} \sum_{i=1}^m D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right)$$

é igual a equação (5.71)  $\frac{1}{2\eta_j} \frac{d\eta_j}{dt}$  e  $\frac{1}{V_{oj}} = \frac{3}{4\pi r_{oj}^3}$ , portanto a

### 6ª Equação do Sistema

$$\begin{aligned} \frac{dT_j}{dt} = & \frac{3h}{r_{oj}\eta_j^{1/2}\rho_{gsl}c_{p_{gsl}}}(T_g - T_j) - \frac{3T_j}{2\eta_j}\frac{d\eta_j}{dt} \\ & - \frac{1}{V_{0j}\rho_{gsl}\eta_j^{3/2}c_{p_{gsl}}}\sum_{i=1}^m\lambda_i\frac{dm_{ij}}{dt}. \end{aligned} \quad (5.95)$$

### 5.5.8 7ª Equação: Variação da Temperatura do Gás

Geralmente, as reações não ocorrem somente em uma temperatura padrão  $T_0$ , mas numa parte da reação pode surgir uma temperatura  $T_i$ , onde  $T_i$  pode ser maior ou menor que  $T_0$  [2].

Durante a combustão, uma parte do calor envolvido é usado para aquecer o produto para uma temperatura  $T_2$ . Para um balanço de energia na fase gasosa para processos multicomponentes [1, 2, 3], tem-se

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(c_{p_{gsl}}m_jT_j) = & h\sum_{j=1}^n n_j A_j(T_g - T_j) + \lambda_{H_2O}^c \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \lambda_{H_2O}^s \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} \\ & + c_p \sum_{j=1}^n n_j T_j \frac{dm_j}{dt}, \end{aligned} \quad (5.96)$$

onde  $n_j$  é a quantidade de raios iniciais,  $\lambda_{H_2O}^c$  é o calor de vaporização na fase de condensação da água,  $\lambda_{H_2O}^s$  é o calor de vaporização na fase de solidificação da água,  $\frac{dm_{H_2O}^v}{dt}$  é a variação da massa da água no estado vapor e  $\frac{dm_{H_2O}^s}{dt}$  é a variação da massa da água no estado gelo.

Aplicando a regra da cadeia na equação (5.96), obtém-se

$$\begin{aligned} c_p \left( m_g \frac{dT_g}{dt} + T_g \frac{dm_g}{dt} \right) = & h \sum_{j=1}^n n_j A_j(T_g - T_j) + \lambda_{H_2O}^c \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} \\ & - \lambda_{H_2O}^s \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} + c_p \sum_{j=1}^n n_j T_j \frac{dm_j}{dt}. \end{aligned} \quad (5.97)$$

Isolando o termo  $m_g \frac{dT_g}{dt}$  e passando o termo  $c_p$  dividindo os outros termos na equação (5.97), tem-se

$$m_g \frac{dT_g}{dt} = \frac{h}{c_p} \sum_{j=1}^n n_j A_j (T_g - T_j) + \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} + \sum_{j=1}^n n_j T_j \frac{dm_j}{dt} - T_g \frac{dm_g}{dt}. \quad (5.98)$$

Mas, derivando a equação (5.37) obtém-se  $\frac{dm_g}{dt} = \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \sum_{j=1}^n n_j \frac{dm_j}{dt}$  que substituída na equação (5.98) fica,

$$m_g \frac{dT_g}{dt} = \frac{h}{c_p} \sum_{j=1}^n n_j A_j (T_g - T_j) + \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} + \sum_{j=1}^n n_j T_j \frac{dm_j}{dt} - T_g \left( \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \sum_{j=1}^n n_j \frac{dm_j}{dt} \right), \quad (5.99)$$

que arranjado os termos semelhantes é equivalente a

$$m_g \frac{dT_g}{dt} = \frac{h}{c_p} \sum_{j=1}^n n_j A_j (T_g - T_j) + \left( \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} - T_g \right) \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} + \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) \frac{dm_j}{dt}. \quad (5.100)$$

Substituindo  $\frac{dm_j}{dt}$  pela equação (5.64), pode-se escrever a equação anterior da seguinte forma,

$$m_g \frac{dT_g}{dt} = \frac{h}{c_p} \sum_{j=1}^n n_j A_j (T_g - T_j) + \left( \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} - T_g \right) \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} + \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) A_j \sum_{i=1}^n K_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.101)$$

Com  $A_j = 4\pi r_j^2$ ,  $K_{ij} = \frac{\rho D_{ij}}{r_j}$ , pode-se substituir na equação (5.101), obtendo

$$m_g \frac{dT_g}{dt} = \frac{4\pi h}{c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_j^2 (T_g - T_j) + \left( \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} - T_g \right) \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} + 4\pi \rho \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) r_j \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.102)$$

Mas  $r_j = r_{0j}\eta_j^{1/2}$ . Então,

$$\begin{aligned}
m_g \frac{dT_g}{dt} &= \frac{4\pi h}{c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) \\
&+ \left( \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} - T_g \right) \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} \\
&+ 4\pi \rho \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) r_{0j} \eta_j^{\frac{1}{2}} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.103)
\end{aligned}$$

Multiplicando o último termo da equação (5.103) por  $\frac{6r_{0j}^2 \rho_{gsl}}{6r_{0j}^2 \rho_{gsl}}$  para o aparecimento do volume da gota  $V_{0j}$ , obtém-se

$$\begin{aligned}
m_g \frac{dT_g}{dt} &= \frac{4\pi h}{c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) \\
&+ \left( \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} - T_g \right) \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} \\
&+ \frac{4}{3} \pi \rho \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) \frac{6r_{0j}^3 \rho_{gsl}}{2r_{0j}^2 \rho_{gsl}} \eta_j^{1/2} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right), \\
m_g \frac{dT_g}{dt} &= \frac{4\pi h}{c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) \\
&+ \left( \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} - T_g \right) \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} \\
&+ \rho_{gsl} \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) \frac{6}{2} \frac{4}{3} \pi r_{0j}^3 \frac{\rho}{r_{0j}^2 \rho_{gsl}} \eta_j^{1/2} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right), \\
m_g \frac{dT_g}{dt} &= \frac{4\pi h}{c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) \\
&+ \left( \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} - T_g \right) \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt}
\end{aligned}$$

$$+ \rho_{gsl} \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) \frac{6}{2} V_{0j} \frac{\rho}{r_{0j}^2 \rho_{gsl}} \eta_j^{1/2} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (5.104)$$

Novamente observa-se que a última parte é igual a equação (5.71),  $\frac{1}{2\eta_j^{1/2}} \frac{d\eta_j}{dt}$ , que substituída na equação (5.105) e isolando  $\frac{dT_g}{dt}$ , tem-se

$$\begin{aligned} \frac{dT_g}{dt} &= \frac{4\pi h}{m_g c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) \\ &+ \frac{1}{m_g} \left( \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} - T_g \right) \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \frac{\lambda_{H_2O}^s}{m_g c_p} \frac{dm_{H_2O}^s}{dt} \\ &+ \frac{3}{2m_g} \rho_{gsl} \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) V_{0j} \eta_j^{1/2} \frac{d\eta_j}{dt}. \end{aligned} \quad (5.105)$$

A equação (5.85) tem a forma

$$\frac{dm_{H_2O}^v}{dt} = M_{H_2O} \left( \frac{d(y_{H_2O} N_T)}{dt} \right).$$

Substituindo  $N_T$  por  $\frac{PV}{RT}$  e  $y_{H_2O}$  por  $\frac{P_{H_2O}}{P}$ , a equação fica

$$\frac{dm_{H_2O}^v}{dt} = \frac{M_{H_2O} V}{R} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{P_{H_2O}}{T_g} \right), \quad (5.106)$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{dm_{H_2O}^v}{dt} = \frac{M_{H_2O} V}{R} \frac{d}{dT_g} \left( \frac{P_{H_2O}}{T_g} \right) \frac{dT_g}{dt}, \quad (5.107)$$

A equação que mede a variação da massa de gelo é

$$\lambda_{H_2O}^s m_{H_2O} = c_p m_g T_g. \quad (5.108)$$

Derivando em função do tempo, tem-se

$$\frac{dm_{H_2O}^s}{dt} = \frac{c_p m_g}{\lambda_{H_2O}^s} \frac{dT_g}{dt}. \quad (5.109)$$

Substituindo as equações (5.107) e (5.109) na equação (5.105), tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{dT_g}{dt} &= \frac{4\pi h}{m_g c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) \\
&+ \frac{1}{m_g} \left( \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} - T_g \right) \frac{M_{H_2O} V}{R} \frac{d}{dT_g} \left( \frac{P_{H_2O}}{T_g} \right) \frac{dT_g}{dt} \\
&- \frac{\lambda_{H_2O}^s}{m_g c_p} \frac{c_p m_g}{\lambda_{H_2O}^s} \frac{dT_g}{dt} \\
&+ \frac{3}{2m_g} \rho_{gsl} \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) V_{0j} \eta_j^{1/2} \frac{d\eta_j}{dt}.
\end{aligned} \tag{5.110}$$

Simplificando os termos  $\lambda_{H_2O}^s$ ,  $m_g$  e  $c_p$  e agrupando os termos que contém  $\frac{dT_g}{dt}$  no primeiro membro,

$$\begin{aligned}
\frac{dT_g}{dt} &\left[ 1 + \frac{1}{m_g} \left( T_g - \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} \right) \frac{M_{H_2O} V}{R} \frac{d}{dT_g} \left( \frac{P_{H_2O}}{T_g} \right) + 1 \right] \\
&= \frac{4\pi h}{m_g c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) \\
&+ \frac{3}{2m_g} \rho_{gsl} \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) V_{0j} \eta_j^{1/2} \frac{d\eta_j}{dt}.
\end{aligned} \tag{5.111}$$

Desta forma, obtém-se a

### 7ª Equação do Sistema

$$\frac{dT_g}{dt} = \frac{\alpha}{1 + \beta + \gamma}, \tag{5.112}$$

onde

$$\alpha = \frac{4\pi h}{m_g c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) + \frac{3}{2m_g} \rho_{gsl} \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) V_{0j} \eta_j^{1/2} \frac{d\eta_j}{dt}, \tag{5.113}$$

$$\beta = \begin{cases} \frac{1}{m_g} \left( T_g - \frac{\lambda_{H_2O}^c}{c_p} \right) \frac{M_{H_2O} V}{R} \frac{d}{dT_g} \left( \frac{P_{H_2O}}{T_g} \right), & \text{se } y_{H_2O} \geq \frac{P_{H_2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P} \end{cases} \tag{5.114}$$



e

$$\gamma = \begin{cases} 1, & \text{se } y_{H_2O} \geq \frac{P_{H_2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P} \end{cases} \quad \text{e } T_g \leq 0 \quad \text{e } T_g > 0. \quad (5.115)$$

As condições sobre os valores de  $\beta$  e  $\gamma$  ocorrem porque seus valores somente serão diferentes de zero quando houver condensação e congelamento da água, respectivamente.

### 5.5.9 Resumo do Sistema de EDO's de 1ª Ordem que Formam o Modelo

Resumidamente, o Modelo para Prever a Vaporização em Antecâmaras de Combustão pode ser expressado pelo sistema de Equações Diferenciais Ordinárias de 1ª Ordem (EDO's) da seguinte forma:

$$\frac{d\eta_j}{dt} = \frac{2\rho}{\rho_{gs} r_{0j}^2} \sum_{i=1}^n D_{ij} \left( \frac{P_i}{P_i^v} - 1 \right). \quad (I)$$

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{P_i}{T_g} \right) = \frac{4\pi\rho D_{ij} R}{V M_i} \left( 1 - \frac{P_i}{P_i^v} \right) \sum_{i=1}^n n_j r_{0j} \eta^{1/2}. \quad (II)$$

$$\frac{dN_T}{dt} = \frac{1}{M_{H_2O}} \frac{dm_{H_2O}^v}{dt} - \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n \frac{1}{M_i} \frac{dm_{ij}}{dt}. \quad (III)$$

$$\frac{dy_{H_2O}}{dt} = \begin{cases} \frac{1}{P} \frac{dT_g}{dt} \frac{\partial P_{H_2O}^v}{\partial T_g}, & \text{se } y_{H_2O} \geq \frac{P_{H_2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P} \end{cases} \quad (IV)$$

$$\frac{dm_{H_2O}^v}{dt} = \begin{cases} M_{H_2O} \left( N_T \frac{dy_{H_2O}}{dt} + y_{H_2O} \frac{dN_T}{dt} \right), & \text{se } y_{H_2O} \geq \frac{P_{H_2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P} \end{cases} \quad (V)$$

As EDO's de (I) à (V) são calculadas por substituição das equações físico-químicas auxiliares apresentadas na seção (5.4).

$$\begin{aligned} \frac{dT_j}{dt} = & \frac{3h}{r_{oj}\eta_j^{1/2}\rho_{gsl}c_{p_{gsl}}}(T_g - T_j) - \frac{3T_j}{2\eta_j} \frac{d\eta_j}{dt} \\ & - \frac{1}{V_{0j}\rho_{gsl}\eta_j^{3/2}c_{p_{gsl}}} \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{dm_{ij}}{dt} \end{aligned} \quad (VI)$$

$$\frac{dT_g}{dt} = \frac{\alpha}{1 + \beta + \gamma}, \quad (VII)$$

onde

$$\alpha = \frac{4\pi h}{m_g c_p} \sum_{j=1}^n n_j r_{0j}^2 \eta_j (T_g - T_j) + \frac{3}{2m_g} \rho_{gsl} \sum_{j=1}^n n_j (T_j - T_g) V_{0j} \eta_j^{\frac{1}{2}} \frac{d\eta_j}{dt}$$

$$\beta = \begin{cases} \frac{1}{m_g} \left( T_g - \frac{\lambda_{H_2O}}{c_p} \right) \frac{M_{H_2O} V}{R} \frac{d}{dT_g} \left( \frac{P_{H_2O}}{T_g} \right), & \text{se } y_{H_2O} \geq \frac{P_{H_2O}^v}{P} \\ 0, & \text{se } y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P} \end{cases}$$

$$\gamma = \begin{cases} 1, & \text{se } y_{H_2O} \geq \frac{P_{H_2O}^v}{P} \quad \text{e } T_g \leq 0 \\ 0, & \text{se } y_{H_2O} < \frac{P_{H_2O}^v}{P} \quad \text{e } T_g > 0. \end{cases}$$

As EDO's (VI) e (VII) têm sua solução pelo Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem. O método é aplicado por serem as equações que determinam as temperaturas da gota e do gás, portanto sua aproximação deve ser bem significativa.

Na EDO (VII),  $\beta$  e  $\gamma$  possuem condições por dependerem do processo de condensação e congelamento da água, respectivamente.

## 5.6 Programação Computacional do Modelo

A programação computacional da pesquisa foi elaborada na linguagem Fortran [26], utilizando a ferramenta Lahey-Fortran 95 5.0.

O programa possui sete arquivos auxiliares, com extensão .DAT, que possuem as informações de cada composto na seguinte ordem: massa molar, constantes de Antoine, calor específico e calor de vaporização, as quais são lidas no início do processo.

Os resultados são armazenados em três arquivos: um com todas as informações calculáveis do programa para verificação de alguma falha no processo chamado de Resulta.dat, outro com os resultados necessários finais (Finais.dat) e o último com os valores prontos para serem exportados para um programa de Planilha de Cálculo (por exemplo, Microsoft Excel) para geração dos gráficos (Graficos.dat).

O programa possui plataforma MS-DOS, mas executável em qualquer versão do Microsoft Windows do mercado. Foi estabelecido esta plataforma para agilizar o desenvolvimento, pois o programa só possui duas telas de apresentação, permitindo assim, como recomendação a transformação futura para a versão MS - Visual.

### 5.6.1 A Metodologia do Programa Computacional

O programa inicia com a seleção dos compostos pelo usuário, através da tela de entrada (Apêndice B - figura C.1). A seguir aparecem as opções dos dados de entrada (Apêndice B - figura C.2) como: raio médio, número de raios, tempo final de simulação, pressão inicial, temperatura inicial, umidade inicial e as frações mássicas dos compostos selecionados na tela anterior.

Após a entrada dos dados, o programa faz uma leitura dos arquivos: Benzeno.dat, Ciclopentano.dat, Decano.dat, Metanol.dat, MTBE.dat, Octano.dat e

Tolueno.dat dos compostos selecionados, carregando na memória as informações da massa molar, as constantes de pressão de vapor, calor específico e calor de vaporização de cada composto e em seguida inicia os cálculos das equações auxiliares.

Ao término das equações auxiliares, o programa transfere todos os cálculos efetuados para as equações diferenciais e inicia a resolução das cinco primeiras equações. Em seguida prepara para o cálculo das temperaturas das gotículas e do gás e refaz o cálculo até o último passo registrado pelo intervalo de integração, utilizando método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Ao final do processo, o programa chama automaticamente os arquivos resulta.dat (Apêndice B - figura C.3), finais.dat e graficos.dat para que o usuário possa utilizar e checar da melhor forma possível os resultados obtidos. Se a quantidade de linhas for pequena, abre-se o programa Bloco de Notas dos Acessórios do MS-Windows, caso contrário, o programa acionado é o MS-Wordpad.

A seguir é apresentado o fluxograma do programa computacional.

### 5.6.2 O Fluxograma

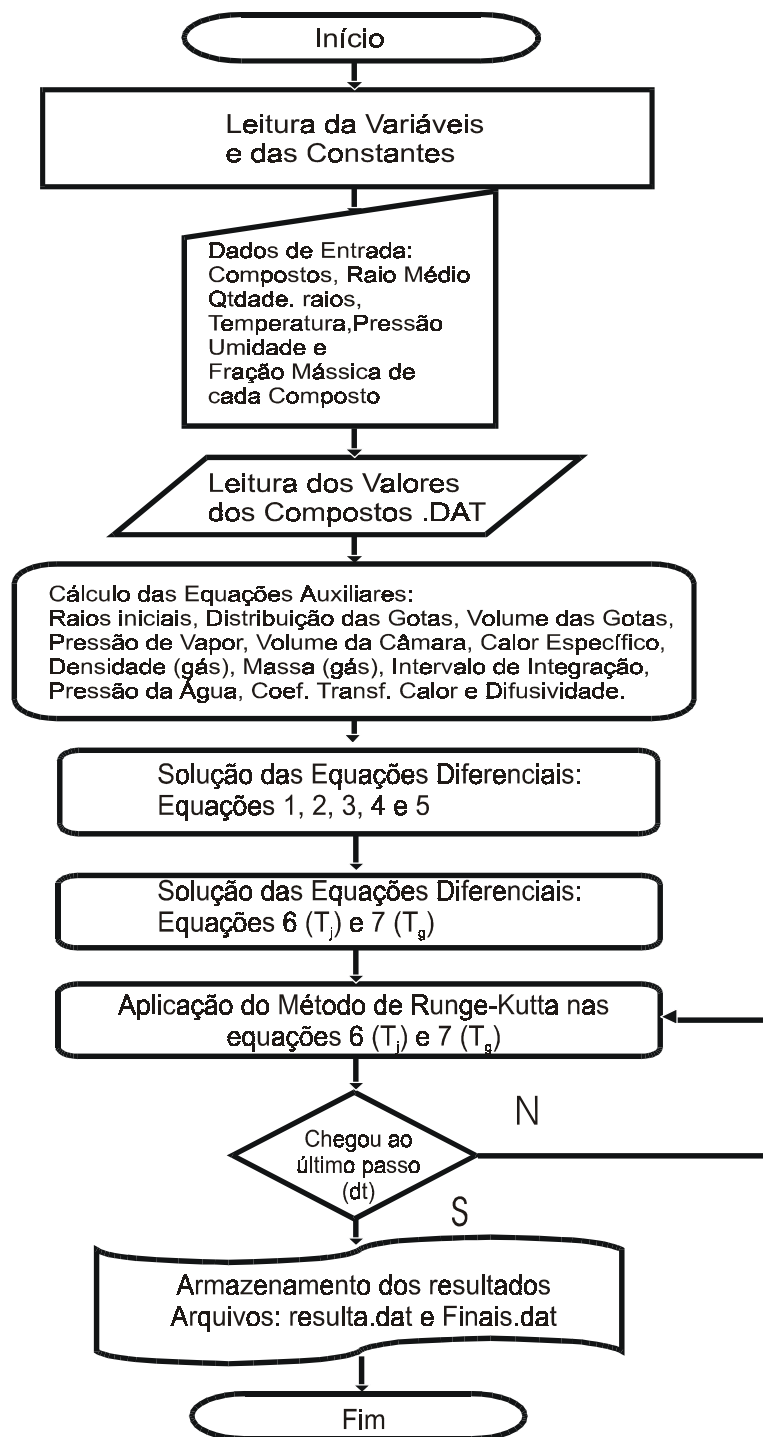


Figura 5.2: Fluxograma do Programa

## Capítulo 6

# Resultados Numéricos e Discussões

O modelo matemático de vaporização deve considerar a gota em sua fase líquida como um processo físico multicomponente, pois, os combustíveis são misturas de vários compostos. Com isto, as características de cada composto e da mistura são implementadas nos cálculos para aproximar a realidade dos resultados. Estas características são: a difusividade mássica de cada espécie - equação (5.30), o raio inicial das gotículas - equação (5.3), a temperatura das gotículas - equação (5.95), o calor específico do combustível a uma pressão constante - equação (5.33), o coeficiente de transferência de calor gotícula-gás obtido por métodos experimentais - equação (5.31), a massa molar de cada composto apresentado na tabela (A.1), a pressão parcial de cada composto - equação (5.12), a pressão total do sistema, que é a soma das pressões parciais dos compostos, o volume da câmara - equação (5.34), o calor de vaporização de cada composto apresentado na tabela (A.4), a densidade do combustível, etc. O volume da câmara é calculado para que exista ar suficiente para uma boa combustão. As condições iniciais, tais como, o raio médio, a amostra de raios, o tempo final de simulação, a pressão inicial, a temperatura inicial, a umidade inicial e as frações mássicas de cada composto, serão apresentadas nas simulações 1, 2 e 3. A composição das gotículas varia de acordo com a

composição do combustível.

## 6.1 Simulação 1

Para a simulação 1 foram escolhidos o Benzeno e o Ciclopentano com um raio médio inicial alto e uma umidade relativa inicial também alta para validar duas hipóteses: (i) quanto maior a umidade relativa, maior será a temperatura final, (ii) quanto maior o raio, menor será a queda de temperatura.

O raio médio inicial é de  $35 \mu m$ , a amostra de raios é 10, o tempo final de simulação é de  $5 ms$  (milésimos de segundo), a pressão inicial de  $1 atm$ , a temperatura inicial é  $25 ^\circ C$ , a umidade de  $90 \%$  e as frações mássicas do Benzeno e Ciclopentano são  $50 \%$  para ambos. Nesta simulação o percentual de solidificação é zero, pois a temperatura da gota teve uma queda média de  $15,3 ^\circ C$ , como mostra a tabela (6.2). Já para a temperatura do gás, obteve-se uma queda de temperatura de  $20,1910 ^\circ C$ .

Tabela 6.1: Temperatura Final das Gotículas na Simulação 1

Raio Inicial $\mu m$	Raio Final $\mu m$	Temperatura Final $^\circ C$
19,2500	2,0000E-8	9,7723
22,7500	2,0000E-8	9,7766
26,2500	2,0000E-8	9,7800
29,7500	1,0000E-8	9,7841
33,2500	1,0000E-8	9,7873
36,7500	1,0000E-8	9,7900
40,2500	1,0000E-8	9,7923
43,7500	1,0000E-8	9,7946
47,2500	1,0000E-8	9,7961
50,7500	1,0000E-8	9,7982

Com o raio médio de  $35 \mu m$  pode-se notar que a queda de temperatura das gotículas foi branda.

Tabela 6.2: Resumo Geral da Simulação 1

Tempo ms.	Temp. Gotículas	Temp. do Gás	Umidade	Massa Evap.
0,2000	25,0000	25,0000	90,1800	2,4776E-03
0,4000	24,4036	25,0000	90,2162	1,5143E-05
0,6000	23,8075	24,8807	90,2703	3,2192E-06
0,8000	23,1898	24,7019	90,3425	2,1236E-06
1,0000	22,5426	24,4636	90,4326	1,9926E-06
1,2000	21,8895	24,1660	90,5414	2,0722E-06
1,4000	21,2424	23,8092	90,6680	2,2087E-06
1,6000	20,6036	23,3935	90,8136	2,3573E-06
1,8000	19,9722	22,9190	90,9763	2,5040E-06
2,0000	19,3472	22,3861	91,1588	2,6447E-06
2,2000	18,7275	21,7950	91,3593	2,7790E-06
2,4000	18,1124	21,1461	91,5789	2,9070E-06
2,6000	17,5013	20,4398	91,8160	3,0295E-06
2,8000	16,8937	19,6765	92,0738	3,1471E-06
3,0000	16,2893	18,8566	92,3490	3,2603E-06
3,2000	15,6879	17,9805	92,6452	3,3695E-06
3,4000	15,0891	17,0489	92,9602	3,4752E-06
3,6000	14,4928	16,0622	93,2958	3,5777E-06
3,8000	13,8989	15,0211	93,6490	3,6772E-06
4,0000	13,3072	13,9260	94,0240	3,7740E-06
4,2000	12,7176	12,7777	94,4190	3,8682E-06
4,4000	12,1300	11,5768	94,8344	3,9602E-06
4,6000	11,5444	10,3240	95,2708	4,0500E-06
4,8000	10,9606	9,02009	95,7288	4,1378E-06
4,9999	10,3786	7,66567	96,2062	4,2237E-06
5,1910	9,79841	6,26159	96,7070	4,3078E-06

A tabela (6.2) traz o resumo geral do comportamento da temperatura das gotas e do gás, da umidade e da massa evaporada com o passar do tempo.

Já a porcentagem de massa evaporada deu-se da seguinte forma:

Massa de Gasolina Inicial:  $2,0366E - 04 \text{ g}$ .

Massa de Gasolina Final:  $4,3078E - 06 \text{ g}$ .

Porcentagem da Massa de Gasolina Evaporada: 97,88%. Esta porcentagem é encontrada dividindo a massa de gasolina final pela inicial, menos



1 (−1) que representa 100%.

Com isto, pode-se concluir que com o passar do tempo a porcentagem de massa evaporada aumenta com a queda de temperatura. Outra observação importante é que nesta simulação não houve o fenômeno de condensação, pois só se dá quando a umidade relativa atinge 100 % e a fração volumétrica é maior que a razão entre a pressão de vapor de água pela pressão total do sistema.

O gráfico (6.1) a seguir, nos mostra a queda de temperatura das gotículas, da temperatura do gás e o comportamento da umidade relativa. A umidade relativa não alcança 100 %, confirmando assim, o não surgimento da condensação.

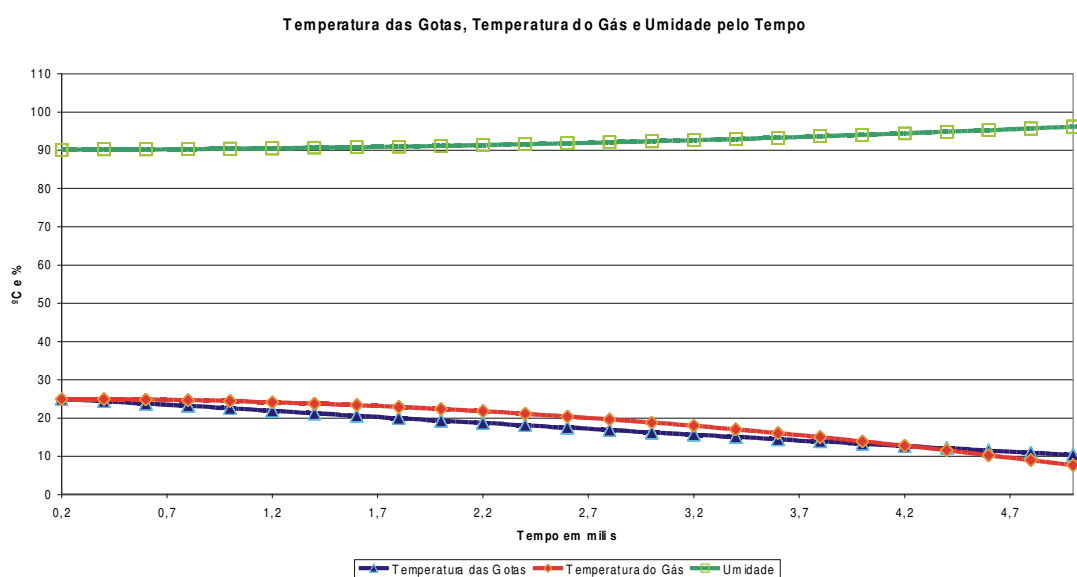


Figura 6.1: Gráfico da Temperatura das Gotículas, Temperatura do Gás e da Umidade pelo Tempo - S1

## 6.2 Simulação 2

A simulação 2 foi proposta a fim de validar as seguintes hipóteses: o tempo final de simulação e a quantidade de compostos. Foram selecionados os compostos Benzeno, Ciclopentano, Decano e MTBE.

Para a simulação 2, o raio médio inicial é de  $80\ \mu m$ , a amostra de raios é 5, o tempo final de simulação é de  $12\ ms$  (milésimos de segundo), a pressão inicial de  $1\ atm$ , a temperatura inicial é  $20\ ^\circ C$ , a umidade de  $90\ \%$  e as frações mássicas do Benzeno, Ciclopentano, Decano e MTBE são, respectivamente,  $40\ \%$ ,  $20\ \%$ ,  $20\ \%$  e  $20\ \%$ . Nesta simulação o percentual de solidificação é diferente de zero, pois a temperatura da gota teve uma queda brusca média de  $29\ ^\circ C$ , como mostra a tabela (6.4). A temperatura do gás ficou em  $-6,7455\ ^\circ C$  e teve uma queda de temperatura de  $26,7455\ ^\circ C$ .

Tabela 6.3: Temperatura Final das Gotículas na Simulação 2

Raio Inicial $\mu m$	Raio Final $\mu m$	Temperatura Final $^\circ C$
40,0000	1,0000E-6	-9,8238
56,0000	7,0000E-7	-9,8486
72,0000	6,0000E-7	-9,8666
88,0000	5,0000E-7	-9,8808
104,0000	4,0000E-7	-9,8925

Esta queda de temperatura brusca se deu pelos fatores: tempo de simulação e quantidade de compostos. Quanto maior o tempo final de simulação, maior será a queda de temperatura, pois é o fator que faz variar os valores. O outro diz respeito à quantidade de compostos, quanto maior a quantidade de compostos, mais variáveis são os valores dos calores de vaporização, influenciando assim no comportamento das temperaturas.

A tabela (6.4) traz o resumo geral do comportamento da temperatura das gotas e do gás, da umidade e da massa evaporada com o passar do tempo.

A porcentagem de massa evaporada ficou sendo:

Massa de Gasolina Inicial:  $4,4411E - 04\ g$ .

Massa de Gasolina Final:  $2,6510E - 05\ g$ .

Porcentagem da Massa de Gasolina Evaporada:  $94,03\ \%$ .

Tabela 6.4: Resumo Geral da Simulação 2

Tempo ms.	Temp. Gotículas	Temp. do Gás	Umidade	Massa Evap.
0,7058	20,0000	20,0000	90,3180	1,3304E-02
1,4117	17,9307	20,0000	90,4456	1,0089E-04
2,1176	15,8825	19,5861	90,6371	2,3032E-05
2,8235	13,9199	18,9662	90,8930	1,5554E-05
3,5294	12,0678	18,1414	91,2138	1,4709E-05
4,2352	10,2480	17,1133	91,6001	1,5335E-05
4,9411	8,4244	15,8839	92,0527	1,6359E-05
5,6470	6,5913	14,4558	92,5726	1,7465E-05
6,3529	4,7513	12,8316	93,1607	1,8553E-05
7,7647	1,0651	9,0090	94,5467	2,0591E-05
8,4705	-0,7755	6,8181	95,3476	2,1540E-05
9,8823	-4,4429	1,8992	97,1735	2,3319E-05
10,588	-6,2671	-0,8188	98,2024	2,4158E-05
11,294	-8,0838	-3,7023	99,3115	2,4968E-05
12,000	-9,8925	-6,7455	100,5032	2,5751E-05

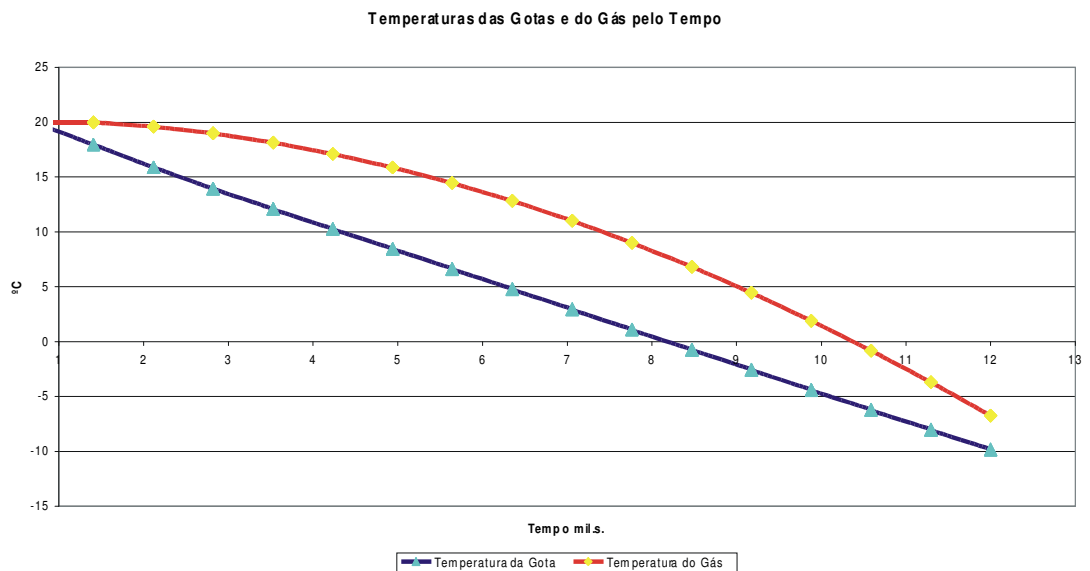


Figura 6.2: Gráfico da Temperatura das Gotículas e Temperatura do Gás pelo Tempo - S2

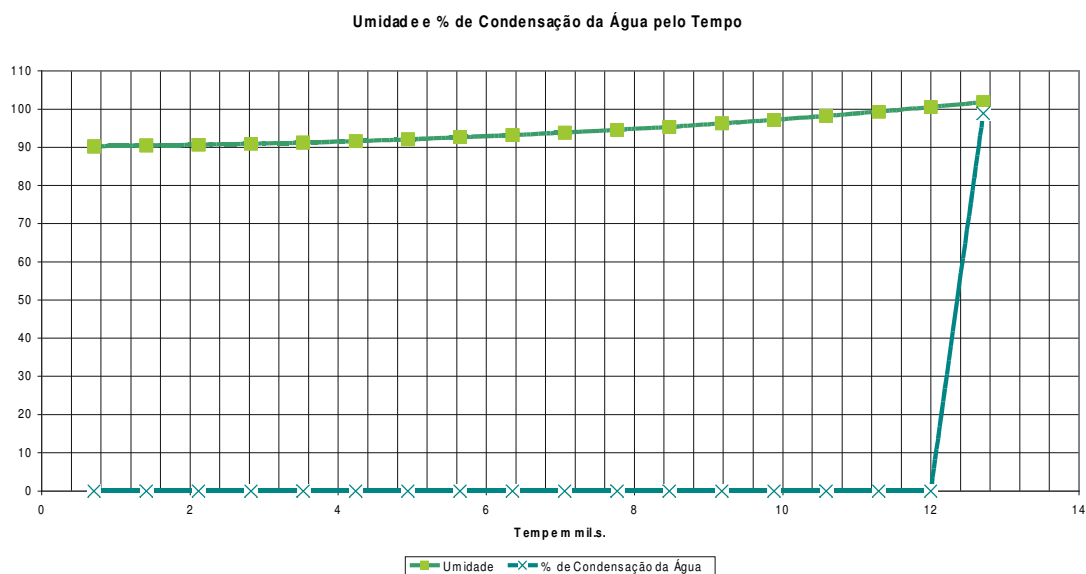


Figura 6.3: Gráfico da Umidade e % de Condensação de Água pelo Tempo - S2

O gráfico (6.3) acima, confirma o que somente haverá o fenômeno da condensação (exotérmico) caso a umidade relativa chegue a 100 %, com isto, a fração volumétrica da água passou a ser maior do que a razão entre a pressão de vapor de água pela pressão total do sistema.

### 6.3 Simulação 3

A simulação 3 foi efetuada para todos os compostos com o raio médio inicial de  $1\ \mu m$ , a amostra de raios é 5, o tempo final de simulação é de  $15\ ms$  (milésimos de segundo), a pressão inicial de  $1\ atm$ , a temperatura inicial é  $25\ ^\circ C$ , a umidade de 85 % e a fração mássicas do Benzeno é de 10 % e a dos demais compostos 15 %. A tabela (6.6) mostra a queda de temperatura das gotículas, confirmando que, quanto menor for o raio da gotícula maior a queda de temperatura, pois sua condutividade térmica é maior e mais calor será absorvido no processo em menos tempo (gráfico 6.4). Os arquivos resultado.dat e finais.dat desta simulação estão no Apêndice C.

Tabela 6.5: Temperatura Final das Gotículas na Simulação 3

Raio Inicial $\mu m$	Raio Final $\mu m$	Temperatura Final $^{\circ}C$
0,5000	5,7302E-5	-15,1986
0,7000	4,1143E-5	-15,1744
0,9000	3,2126E-5	-15,1852
1,1000	2,6367E-5	-15,1999
1,3000	2,2361E-5	-15,2113

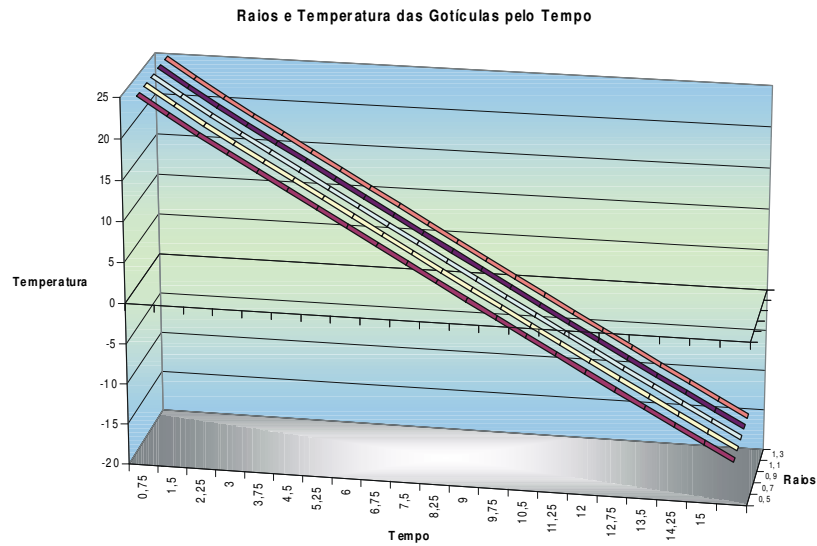


Figura 6.4: Gráfico dos Raios e Temperatura das Gotículas pelo Tempo - S3

A porcentagem de massa evaporada ficou sendo:

Massa de Gasolina Inicial:  $6,9393E - 02 \text{ g}$ .

Massa de Gasolina Final:  $1,4965E - 08 \text{ g}$ .

Porcentagem da Massa de Gasolina Evaporada: 99,99 %

Tabela 6.6: Resumo Geral da Simulação 3

Tempo ms.	Temp. Gotículas	Temp. do Gás	Umidade
0,7500	24,9980	25,0000	85,3192
1,5000	22,7621	25,0000	85,4472
2,2500	20,5766	24,5527	85,6394
3,0000	18,5095	23,8829	85,8963
3,7500	16,4992	22,9918	86,2184
4,5000	14,4928	21,8813	86,6064
5,2499	12,4790	20,5536	87,0611
5,9999	10,4596	19,0117	87,5835
6,7499	8,43900	17,2587	88,1747
7,4999	6,42051	15,2985	88,8360
8,2499	4,40682	13,1351	89,5689
9,0000	2,39984	10,7732	90,3750
9,7500	0,40097	8,2179	91,2562
10,5000	-1,58871	5,4746	92,2143
11,2500	-3,56845	2,5490	93,2518
12,0000	-5,53761	-0,5525	94,3708
12,7500	-7,49572	-3,8236	95,5740
13,5000	-9,44241	-7,2576	96,8643
14,2500	-11,3774	-10,8447	98,244
15,0000	-13,3004	-14,5849	99,718

## Capítulo 7

### Conclusões

A umidade relativa, a temperatura, o raio e o percentual de condensação da água evoluem com o passar do tempo. Nossa análise foi elaborada para três simulações diferentes. A simulação 1, que foi elaborada para dois compostos: Benzeno e Ciclopentano, teve como dados iniciais o raio médio inicial de  $35\ \mu m$ , 10 como a amostra de raios, o tempo final de simulação de  $5\ ms$  (milésimos de segundo), a pressão inicial de  $1\ atm$ , a temperatura inicial de  $25^{\circ}C$ , a umidade inicial de  $90\ \%$  e as frações mássicas do Benzeno e Ciclopentano de  $50\ \%$  para ambos os compostos. Nesta simulação o percentual de solidificação foi zero, pois a temperatura da gota teve uma queda média de  $15,3^{\circ}C$ , como mostra a tabela (6.1). Já para a temperatura do gás, obteve-se uma queda de temperatura de  $20,191^{\circ}C$ . Com o raio médio de  $35\ \mu m$  pode-se notar que a queda de temperatura das gotículas foi branda. A porcentagem da massa de gasolina evaporada foi de  $97,88\ \%$ , com isto, pode-se concluir que com o passar do tempo a porcentagem de massa evaporada aumenta com a queda de temperatura. Outra observação importante é que nesta simulação não houve o fenômeno de condensação, pois só se dá quando a umidade relativa atinge  $100\ \%$ . O gráfico (6.1), nos mostra a queda de temperatura da gotículas, do gás e o comportamento da umidade relativa, não alcançando  $100\ \%$  de umidade, confirmando assim, o não surgimento da condensação.

Na simulação 2, o raio médio inicial é de  $80\ \mu m$ , 5 a amostra de raios,  $12\ ms$  (milésimos de segundo) o tempo final de simulação, a pressão inicial de  $1\ atm$ , a temperatura inicial é  $20\ ^\circ C$ , a umidade inicial de  $90\ %$  e as frações mássicas do Benzeno, Ciclopentano, Decano e MTBE são, respectivamente,  $40\ %$ ,  $20\ %$ ,  $20\ %$  e  $20\ %$ . Nesta simulação o percentual de solidificação é diferente de zero, pois a temperatura da gota teve uma queda brusca média de  $29\ ^\circ C$ , como mostra a tabela (6.3). A temperatura do gás ficou em  $-6,7455\ ^\circ C$  e teve uma queda de temperatura de  $26,7455\ ^\circ C$ . Esta queda brusca de temperatura se deu pelos fatores: tempo de simulação e quantidade de compostos. Quanto maior o tempo final de simulação, maior será a queda de temperatura, pois é o fator que faz variar os valores. O outro diz respeito à quantidade de compostos, quanto maior a quantidade de compostos, mais frações mássicas irão interferir no valor do calor específico do combustível, influenciando assim no comportamento das temperaturas. A porcentagem da massa de gasolina evaporada é de  $94,03\ %$  e o percentual de condensação é de  $98,11\ %$ , surgido pelo motivo que a umidade relativa atingiu  $100\ %$ . Mas para esta simulação a condensação não é um fator preocupante, pois só apareceu no último tempo de simulação ( $12,7\ \mu m$ ). O gráfico (6.3) apresenta este comportamento da condensação, pois a umidade relativa atingiu  $100\ %$  e com isto, a fração volumétrica da água passou a ser maior do que a razão entre a pressão de vapor de água pela pressão total do sistema.

A última simulação foi efetuada para todos os compostos com os seguintes dados: raio médio inicial de  $1\ \mu m$ , 5 a amostra de raios, o tempo final de simulação de  $15\ ms$  (milésimos de segundo), a pressão inicial de  $1\ atm$ , a temperatura inicial de  $25\ ^\circ C$ , a umidade de  $85\ %$  e a fração mássicas do Benzeno de  $10\ %$  e a dos demais compostos  $15\ %$ . A tabela (6.5) mostra a queda de temperatura das gotículas, confirmando que, quanto menor for o raio da gotícula maior a queda de temperatura, pois sua condutividade térmica é maior e mais



calor será absorvido no processo em menos tempo (gráfico 6.4). A porcentagem da massa de gasolina evaporada foi de 99,99 %.

Em todos os resultados a temperatura decresce com o decorrer do tempo. Este efeito é atribuído ao fato da vaporização absorver energia do sistema. A umidade relativa estabiliza em 100 %, mas pode ocorrer valor um pouco acima de 100 % devido à aproximação de erros.

Com todos estes resultados pode-se concluir que:

i) A temperatura das gotículas e do gás cai com o decorrer do tempo, pois a vaporização é um fenômeno endotérmico, isto é, ocorre absorção de calor durante sua realização, fazendo com que a temperatura da antecâmara também caia, podendo chegar a valores abaixo de  $0^{\circ}\text{C}$ . Caso isto ocorra, passa a haver congelamento da água condensada, formando gelo;

ii) Quanto maior for a umidade relativa inicial, maior será a temperatura final, pois a umidade abrandará a queda térmica;

iii) Quanto menor o raio inicial, maior será a queda de temperatura. Isto ocorre porque a gotícula sendo menor, maior será sua condutividade térmica e, conseqüentemente, mais calor será absorvido em menos tempo;

iv) Quando os compostos são vaporizados para uma antecâmara de combustão, cada composto por possuir características específicas de viscosidade e tensão superficial, gera um raio médio específico de gotícula, permitindo com isto que, se estivermos trabalhando com o raio médio real analisado em laboratório, mais próximo do real estará a simulação;

v) A porcentagem de combustível evaporado aumenta com a queda da temperatura no decorrer do tempo;

vi) A condensação do vapor de água, que é um fenômeno exotérmico, isto é, desprende calor, só aparece quando a umidade relativa atinge 100 %, ou seja, quando a fração volumétrica da água passa a ser maior que a razão entre a pressão de vapor de água e a pressão total do sistema. Este processo abrandará

a queda de temperatura;

vii) A respeito do método de Runge-Kutta de 4ª ordem, pode-se concluir que a aplicação do método numérico nas equações (5.95, 5.112) foi excelente para as aproximações das temperaturas finais da gota e do gás.

Uma extensão desta linha de pesquisa para trabalhos futuros seria:

i) A seleção de novos combustíveis que estão surgindo no mercado, como por exemplo o biodiesel (óleo de babaçu, óleo de mamona), o gás natural, entre outros, para novas análises e padronizações;

ii) Comparar os resultados extraídos do programa com dados experimentais reais dos laboratórios, para saber de quanto é a exatidão do modelo apresentado na pesquisa, ou seja, fazendo testes de validação do modelo e do programa desenvolvido.

# Apêndice A

## Tabelas

Tabela A.1: Massa Molar dos Compostos em  $g/mol$

Compostos	$M$
Benzeno	78,114
Ciclopentano	68,119
Decano	142,285
MTBE	88,150
Metanol	32,042
Octano	114,231
Tolueno	92,141

[23]

Tabela A.2: Parâmetros de Antoine para Pressão de Vapor

Compostos	A	B	C
Benzeno	13,7819	2726,81	217,5721
Ciclopentano	13,9727	2653,90	234,510
Decano	13,9748	3442,76	193,858
MTBE	14,1334	2838,24	218,690
Metanol	16,5785	3638,27	239,500
Octano	13,9346	3123,13	209,635
Tolueno	13,9320	3056,96	217,625

[23]

Tabela A.3: Calor Específico dos Compostos em  $cal/(gK)$

Compostos	$c_p$
Benzeno	136,00
Ciclopentano	128,80
Decano	314,40
MTBE	187,50
Metanol	81,10
Octano	254,60
Tolueno	157,30

[27]

Tabela A.4: Calor de Vaporização dos Compostos em  $J/mol$

Compostos	$\lambda$
Benzeno	0,030710
Ciclopentano	0,029213
Decano	0,038750
MTBE	0,027940
Metanol	0,035210
Octano	0,03441
Tolueno	0,05309

[23]

## Apêndice B

# Fundamentos Físico-Químicos

Baseiam-se nos conceitos físicos-químicos básicos, para familiarizar o leitor com alguns termos técnicos apresentados na pesquisa.

### B.1 Termodinâmica

A ciência da termodinâmica envolve o estudo da energia associada com uma certa quantidade de matéria ou com um volume definido do espaço. O estudo da energia de um sistema termodinâmico é realmente elementar e a energia pode entrar ou deixar o sistema e ser transferida em apenas duas formas: calor ou trabalho.

### B.2 Combustão Interna

Trata-se de uma reação termoquímica onde o princípio de funcionamento é comprimir o ar violentamente, reduzindo seu volume de 20 vezes para 1, elevando a temperatura do ar em até 250°C, uns 20° de ângulo antes que o pistão chegue ao ponto morto superior (APMS), quando se injeta o combustível em forma de uma fina névoa. As gotículas têm que se misturar com o ar quente, passando do estado líquido para o estado gasoso. Quando o pistão começa a descer, 30° de ângulo depois do ponto morto superior (DPMS), a mistura se

acende e forma-se a chama, assim transforma a energia calorífica em energia mecânica.

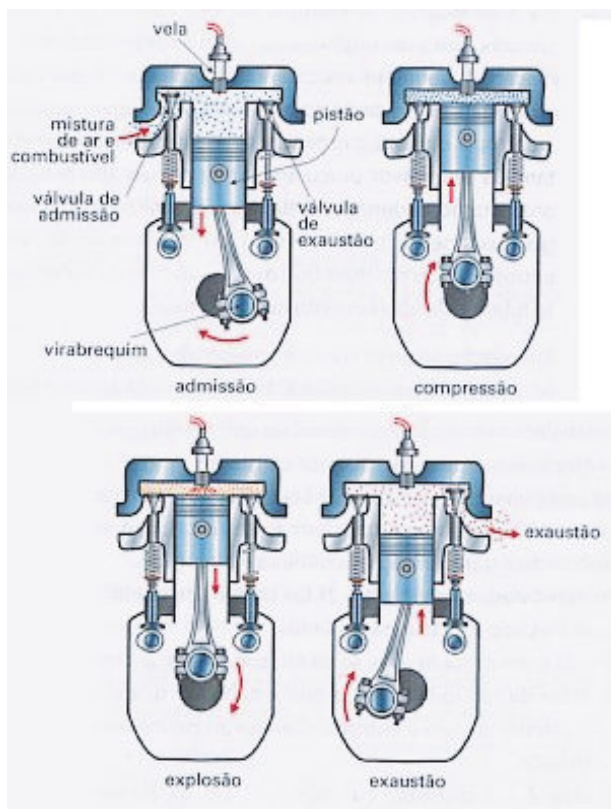


Figura B.1: Motor a Combustão Interna.  
[28]

De acordo com a figura (B.1), na parte superior do motor encontram-se as válvulas, que controlam a entrada e saída do fluido combustível, e a vela, na qual se dá a faísca que provoca a explosão. Na inferior, está o virabrequim, espécie de eixo que exerce a função de manivela que movimenta o motor e é movimentado por ele. De forma simplificada, para o funcionamento de um motor de quatro tempo tem-se: no tempo 1 ocorre a **admissão** do combustível, mistura de ar e vapor de álcool ou gasolina - o virabrequim faz o êmbolo (pistão) descer enquanto a válvula de admissão se abre, reduzindo a pressão interna e possibilitando a entrada do combustível à pressão atmosférica. No tempo 2 ocorre a **compressão**: com as válvulas fechadas, o êmbolo sobe movido pelo

virabrequim, comprimindo a mistura combustível - o ambiente realiza trabalho sobre o motor. No tempo 3 ocorre a **explosão**: no ponto em que a compressão é máxima, produz-se nos terminais da vela uma faísca elétrica, que provoca a explosão do combustível e seu aumento de temperatura; a explosão empurra o êmbolo para baixo, ainda com as válvulas fechadas - o motor realiza trabalho contra o ambiente fazendo o virabrequim girar. No tempo 4 ocorre a **exaustão** ou descarga: o êmbolo sobe novamente, a válvula de exaustão se abre, expulsando os gases queimados na explosão e reiniciando o ciclo [28].

## B.3 Dinâmica dos Fluidos

A dinâmica dos fluidos é o estudo dos fluidos em movimento. Denomina-se fluido qualquer substância que pode fluir; o termo pode ser usado para um gás ou líquido. Considera-se que o gás é o fluido que pode ser facilmente comprimido e um líquido é quase incompressível, existindo casos excepcionais.

## B.4 Densidade

Uma propriedade importante de qualquer material é a sua densidade, que é definida como sendo a massa por unidade de volume. Em outras palavras, é a massa específica. Quando uma massa  $m$  de um material homogêneo possui volume  $V$ , sua densidade é  $\rho$ , dada pela fórmula:

$$\rho = \frac{m}{V}. \quad (\text{B.1})$$

Em geral, a densidade de um material depende de fatores ambientais como temperatura e pressão.

## B.5 Massa Atômica e Massa Molecular

Massa atômica de um átomo é a massa desse átomo expressa em unidades

( $u$ ). O átomo de Carbono 12 ( $^{12}C$ ) foi escolhido como átomo padrão na construção das escalas de massas atômicas. Sua massa atômica foi fixada em  $12\,u$ .

Massa atômica de um elemento formado por uma mistura de isótopos é a massa média ponderada dos átomos desse elemento expressa em  $u$ . É igual à média ponderada das massas atômicas dos isótopos constituintes do elemento.

Massa molecular de uma substância é a massa da molécula dessa substância expressa em  $u$ . Indica quantas vezes a massa da molécula dessa substância é maior que a massa de  $1/12$  do átomo de  $^{12}C$ . A massa molecular de uma substância é numericamente igual à soma das massas atômicas de todos os átomos da molécula dessa substância.

## B.6 Mol, Massa Molar e Número de Mols

Mol é a quantidade de matéria (ou de substância) que contém tantas entidades elementares representadas pela respectiva fórmula, quantos são os átomos de  $^{12}C$  contidos em  $0,012\,kg$  de  $^{12}C$ .

Constante de Avogadro (antigamente chamada número de Avogadro) é o número de átomos de  $^{12}C$  contidos em  $0,012\,kg$  de  $^{12}C$ . Seu valor numérico é:  $6,02 \cdot 10^{23}\,mol^{-1}$ .

Massa molar é a massa de substância que contém  $6,02 \cdot 10^{23}$  entidades representadas pela fórmula dessa substância. É comumente expressa em  $g/mol$  ou  $g \cdot mol^{-1}$ . Exemplo do Benzeno em [29], sua fórmula química é  $C_6H_6$ , então  $12,01 \cdot 6 + 1,01 \cdot 6 = 78,12\,g/mol$ .

Número de Mols é a relação entre a massa da substância e sua massa molar [9, 29].



## B.7 Fração Mássica

A fração mássica de um componente de uma mistura é a relação entre a massa específica e a massa total da mistura.

$$Y_i = \frac{\rho_i}{\rho} = \frac{\text{massa específica de } i}{\text{massa específica da mistura}}; \sum_{i=1}^m Y_i = 1, \quad (\text{B.2})$$

com  $m$  sendo o número de compostos e  $Y_i$  a fração mássica do composto  $i$  [6].

## B.8 Difusividade Mássica

Mede a rapidez com que uma massa recém evaporada de um determinado composto afasta-se da gotícula, isto é, se dissipa [6, 9].

## B.9 Transferência de Calor

Quando uma transferência de energia é o resultado de apenas uma diferença de temperaturas, sem a presença de trabalho, então esta transferência de energia recebe o nome de transferência de calor [28].

## B.10 Coeficiente de Transferência de Calor

Supondo que um sistema fechado seja introduzido em um ambiente cuja temperatura é  $T_a$  do ambiente e  $T$  a temperatura em todos os pontos do sistema. Se  $T_a < T$ , haverá um fluxo de calor do mais quente para o mais frio medido pelo gradiente de temperatura. A transferência de calor lida com o estudo das taxas de energia transportadas e as respectivas distribuições de temperatura no sistema. Esta transferência pode ser por condução<sup>1</sup> ou con-

---

<sup>1</sup>Transferência de energia ocorre do meio de alta para o meio de baixa temperatura.

vecção<sup>2</sup>. O coeficiente empregado na pesquisa será o da taxa na qual o gás transmite calor para as gotas por convecção. O coeficiente de transferência de calor por convecção  $h_{tc}$  é igual a taxa de transferência de calor  $Q$  dividido pela área superficial do corpo  $A$  que está em contato com o fluido e a diferença de temperaturas  $\Delta T$ . Esta relação é conhecida como Lei de Resfriamento de Newton [9, 28].

$$h_{tc} = \frac{Q}{A\Delta T}. \quad (\text{B.3})$$

A sua unidade é  $\text{cal}/(\text{s}.\text{cm}^2.K)$  onde  $\text{cal}/\text{s}$  é a unidade de transferência de calor pelo tempo,  $\text{cm}^2$  a da área e  $K$  a temperatura em Kelvin.

## B.11 Calor

É a energia em trânsito devido à diferença de temperaturas e que não está associado com a transferência de massa [28].

## B.12 Energia Interna

A soma de todas as contribuições microscópicas (densidade, massa, etc) recebe o nome de energia interna, de símbolo  $U$ , para a energia interna por unidade de massa (ou específica), respectivamente. Assim, energia interna é toda a energia de um sistema que está associada com os componentes microscópicos - átomos e moléculas - quando vistos a partir de um referencial em repouso com o sistema. Pela 1ª Lei da Termodinâmica, a energia interna  $U$  de um sistema isolado é conservada, isto é, não pode ser criada nem destruída. Ela pode ser convertida de uma forma em outra forma de energia.

---

<sup>2</sup>Transferência de calor ocorre no fluido da combinação da difusão molecular e do movimento do fluido.

A variação de energia é diferença entre o calor  $q$  liberado para o meio ambiente e o trabalho  $w$  realizado pelo sistema. Com isto, tem-se

$$\Delta U = U_{final} - U_{inicial} = q - w. \quad (\text{B.4})$$

Calor  $q$  é reflexo do movimento aleatório das moléculas e o trabalho  $w$  é a força vezes o deslocamento, conhecido como reflexo do movimento organizado das moléculas [6].

## B.13 Primeira Lei da Termodinâmica

É um enunciado da conservação de energia aplicado a um sistema. Esse princípio afirma que a variação na energia do sistema é igual a variação da energia interna que cruza a fronteira do sistema. Portanto, considerando que a energia está distribuída uniformemente na massa, para um processo entre o intervalo  $t_1$  e  $t_2$  pode-se escrever:

$$U_2 - U_1 = Q_{1 \rightarrow 2} + W_{1 \rightarrow 2}, \quad (\text{B.5})$$

onde  $U_2 - U_1$  é a variação da energia interna do sistema ( $\Delta U$ ),  $q_{1 \rightarrow 2}$  é o fluxo de calor que atravessa a fronteira do sistema e  $w_{1 \rightarrow 2}$  é o trabalho do gás para ir do estado 1 para o estado 2 [28, 6, 7].

## B.14 Entalpia

É a função termodinâmica de estado. Vem do grego *enthalpein*, que quer dizer aquecer e é representada por  $H$ . A maioria das reações ocorre em fluidos (gases ou líquidos). Nesse caso, o trabalho  $w$  realizado é do tipo pressão-volume ( $PV$ ) [22, 28].

Inicia-se pela equação:  $H \equiv U + PV$ , onde  $H$  é a entalpia,  $U$  a energia interna (ver equação B.4),  $P$  a pressão absoluta e  $V$  o volume total.

O aquecimento (variação da entalpia) pode ser definido como

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(PV) = q - w + \Delta(PV). \quad (\text{B.6})$$

Uma variação na entalpia de um sistema a pressão constante é igual ao calor liberado ou absorvido.

$$\Delta H = q \quad (\text{B.7})$$

Quando a energia é transferida como calor, a entalpia do sistema aumenta. Quando a energia deixa o sistema, a entalpia diminui.

Suponha-se um processo isotérmico que seja realizado à temperatura  $T$  do líquido comprimido. Este processo irá se realizar desde a pressão de saturação correspondente à  $T$  até a pressão  $P$  a que o líquido está submetido. Neste processo isotérmico, a variação de energia interna é nula e pela nossa aproximação, a variação de volume específico também será. Portanto:

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(PV) = V\Delta P. \quad (\text{B.8})$$

## B.15 Lei dos Gases Ideais

Em condições de pressões baixas ou moderadas e de temperaturas não muito baixas, alguns gases comuns, como o ar, entre outros, podem ser considerados ideais. Quase todos os gases quimicamente estáveis se comportam como ideais, se estiverem longe das condições de liquefação ou solidificação, isto é, se os seus átomos ou moléculas estiverem suficientemente afastados uns dos outros, para que as suas interações possam ser desprezadas. Em geral, à temperatura ambiente,  $T = 20^\circ \text{C}$  ( $T = 293,15\text{K}$ ) e pressão atmosférica padrão,  $P_0 = 1,013 \cdot 10^5 \text{Pa}$  ou  $1 \text{ bar}$ , a maioria dos gases podem ser considerados como ideais [7, 28].

Em 1662, Robert Boyle descobriu que em uma transformação isotérmica<sup>3</sup> de uma dada massa gasosa, a pressão é inversamente proporcional ao volume ( $P = \frac{k}{V}$ ). Em alguns países da Europa a descoberta desta lei é atribuída a Edme Mariotte que, no entanto, só publicou os seus trabalhos em 1676. Em grande parte da literatura a lei é conhecida como Lei de Boyle-Mariotte e tem o seguinte aspecto:

$$PV = k_T. \quad (\text{B.9})$$

Experimentalmente foi determinado que  $k_T$  é diretamente proporcional à temperatura  $T$  e ao número de mols de gás,  $N = \frac{m}{M}$  (m: massa do gás, M: massa molar), então  $k_T$  pode ser escrito por

$$k_T = NR_T T. \quad (\text{B.10})$$

onde  $R_T$  é a constante de proporcionalidade.

Jacques Charles em 1787, descreve a relação linear existente entre o volume e a temperatura de um gás ideal, se a pressão se mantiver constante. Matematicamente

$$V = k_P T. \quad (\text{B.11})$$

Experimentalmente foi determinado que  $k_P$  é inversamente proporcional à pressão  $P$  e diretamente proporcional ao número de mols de gás  $N$ , sendo a constante de proporcionalidade  $R_P$ ,

$$k_P = \frac{(NR_P)}{P}. \quad (\text{B.12})$$

Joseph Louis Gay-Lussac nos princípios do século XIX, relaciona linearmente a pressão e a temperatura de um gás ideal, se o volume se mantiver constante.

$$P = k_V T. \quad (\text{B.13})$$

---

<sup>3</sup>Que tem a mesma temperatura.

Experimentalmente foi determinado que  $k_V$  é inversamente proporcional ao volume  $V$  e diretamente proporcional ao número de mols de gás  $N$ , sendo a constante de proporcionalidade  $R_V$ ,

$$k_V = \frac{(NR_V)}{V}. \quad (\text{B.14})$$

Experimentalmente verificou-se que  $R_T = R_P = R_V = R$ , sendo assim, as leis de Boyle-Mariotte, de Charles e de Gay-Lussac, podem ser combinadas numa equação, denominada **Equação de Estado dos Gases Ideais**:

$$PV = NRT. \quad (\text{B.15})$$

A constante  $R$  denomina-se **Constante Universal dos Gases**, e é dada por  $R = 8,314 \text{ J.mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$  [28].

# Apêndice C

## Telas do Programa

Programa para Análise de Combustíveis

-----

Modelo Matemático para Prever a Vaporização  
em Antecâmara de Combustão

Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia  
MINTER - UFPr / UNICENTRO - 2003 - 2005

Mestrando: Marcos Freitas de Moraes  
Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Lílilana Gramani Cumin

Selecione os Compostos:

- 1 - Benzeno
- 2 - Ciclipentano
- 3 - Decano
- 4 - MTBE
- 5 - Metanol
- 6 - Octano
- 7 - Tolueno
- 0 - Sair

Por favor, digite o nome dos compostos em ordem crescente sem espaço entre eles e tecla [Enter], Ex.: 1234567 [enter] :

Figura C.1: Tela Inicial do Programa

Programa para Análise de Combustíveis

---

Modelo Matemático para Prever a Vaporização  
em Antecâmara de Combustão

Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia  
MINTER - UFPR / UNICENTRO - 2003 - 2005

Mestrando: Marcos Freitas de Moraes  
Orientadora: Profª. Drª. Líliliana Gramani Cumin

Composto(s) Selecionado(s).....:

Entre com o Raio Médio Inicial das Gotas ( $\mu\text{m}$ ) .....:

Entre com o Número de Raios ou Diâmetros da Gota.....:

Entre com o Tempo Final de Simulação (mil. s.).....:

Entre com a Pressão Inicial (atm) .....:

Entre com Temperatura Inicial ( $^{\circ}\text{C}$ ) .....:

Entre com Umidade Inicial (%) .....:

Entre com Fração Mássica do Composto .....:

Figura C.2: Tela dos Dados de Entrada

resulta - Bloco de notas

Arquivo Editar Pesquisar Ajuda

---

Programa Para Análise de Combustíveis

---

Modelo para Prever a Vaporização  
em Antecâmaras de Combustão

Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia  
MINTER - UNICENTRO - UFPR - 2005

Mestrando: Marcos Freitas de Moraes  
Orientadora: Líliliana Gramani Cumin

---

12/02/2005

Dados de Entrada

---

Raio Médio Inicial.....: 1.0000  $\mu\text{m}$

Número de Raios ou Diâmetros.....: 0010

Composto(s) Selecionado(s).....: Benzeno

Pressão Inicial.....: 1.00 atm

Temperatura Inicial.....: 20.00  $^{\circ}\text{C}$  -> 293.15 K

Umidade Inicial.....: 80.00 %

Tempo Final de Simulação.....: 1.00000000 mil.s.

Figura C.3: Tela dos Dados de Saída



# Apêndice D

## Arquivos Finais.dat e Resulta.dat - S1

### Finais.dat

+-----+  
Programa Para Análise de Combustíveis  
+-----+  
Modelo para Prever a Vaporização  
em Antecâmaras de Combustão  
Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia  
MINTER - UNICENTRO - UFPR - 2005  
Mestrando: Marcos Freitas de Moraes  
Orientadora: Profª Dra. Lílíana Gramani Cumin  
+-----+  
01/03/2005

#### Dados de Entrada

Raio Médio Inicial.....: 35.0000 micra m.  
Número de Raios ou Diâmetros.....: 0010  
Composto(s) Selecionado(s).....: Benzeno/Ciclopentano  
Pressão Inicial.....: 1.00 atm  
Temperatura Inicial.....: 25.00 °C - 298.15 K  
Umidade Inicial.....: 90.00 %  
Tempo Final de Simulação.....: 5.00000000 ms.

#### +-----+ Resultados Finais +-----+

##### Gotículas:

+-----+  
Raio Inicial µm ! Raio Final µm ! Temperatura °C  
+-----+  
19.25000000 — 0.00000002 — 9.772  
22.75000000 — 0.00000002 — 9.776

26.25000000 — 0.00000002 — 9.780  
 29.75000000 — 0.00000001 — 9.784  
 33.25000000 — 0.00000001 — 9.787  
 36.75000000 — 0.00000001 — 9.790  
 40.25000000 — 0.00000001 — 9.792  
 43.75000000 — 0.00000001 — 9.794  
 47.25000000 — 0.00000001 — 9.797  
 50.75000000 — 0.00000001 — 9.798

Massa de Gasolina Inicial: 2.036610370810349E-04 g.  
 Massa de Gasolina Final: 4.307857618616699E-06 g.  
 Porcentagem da Massa de Gasolina Evaporada: 97.88479049289009 %

Compostos:

Composto ! Pressão Parcial (atm)

Benzeno — 7.171855181540617E-33  
 Ciclopentano — 8.987022402385658E-32

Temperatura do Gás:

Inicial °C ! Final °C

25.000 — 4.809

Umidade %:

Inicial ! Final

90.000 — 96.707

## Resulta.dat

Programa Para Análise de Combustíveis

Modelo para Prever a Vaporização  
 em Antecâmaras de Combustão  
 Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia  
 MINTER - UNICENTRO - UFPR - 2005  
 Mestrando: Marcos Freitas de Moraes  
 Orientadora: Profª Dra. Lílana Gramani Cumin

01/03/2005

Dados de Entrada

Raio Médio Inicial.....: 35.0000 micra m.  
 Número de Raios ou Diâmetros.....: 0010  
 Composto(s) Selecionado(s).....: Benzeno/Ciclopentano  
 Pressão Inicial.....: 1.00 atm  
 Temperatura Inicial.....: 25.00 °C - 298.15 K  
 Umidade Inicial.....: 90.00 %  
 Tempo Final de Simulação.....: 5.00000000 ms.

Números de Equações Diferenciais: 000026  
 Números de Pontos de Integração.: 9615.  
 Intervalo de Integração.....: 0.20000000 ms.

Fração Mássica do Benzeno em %.....: 50.00000000000000  
 Fração Mássica do Ciclopentano em %...: 50.00000000000000

Medida de Cada Raio em micra m

---

Raio(000001) = 19.25000000  
 Raio(000002) = 22.75000000  
 Raio(000003) = 26.25000000  
 Raio(000004) = 29.75000000  
 Raio(000005) = 33.25000000  
 Raio(000006) = 36.75000000  
 Raio(000007) = 40.25000000  
 Raio(000008) = 43.75000000  
 Raio(000009) = 47.25000000  
 Raio(000010) = 50.75000000

O Desvio Padrão é: 21.194 %

Distribuição dos Raios (micra m)

---

Raio(000001) = 19.25000000 — Quantidade de Gotas = 62.  
 Raio(000002) = 22.75000000 — Quantidade de Gotas = 96.  
 Raio(000003) = 26.25000000 — Quantidade de Gotas = 134.  
 Raio(000004) = 29.75000000 — Quantidade de Gotas = 166.  
 Raio(000005) = 33.25000000 — Quantidade de Gotas = 186.  
 Raio(000006) = 36.75000000 — Quantidade de Gotas = 186.  
 Raio(000007) = 40.25000000 — Quantidade de Gotas = 166.  
 Raio(000008) = 43.75000000 — Quantidade de Gotas = 134.  
 Raio(000009) = 47.25000000 — Quantidade de Gotas = 96.  
 Raio(000010) = 50.75000000 — Quantidade de Gotas = 62.

+-----+

Número Total de Gotas = 1290.

Volume das Gotas

---

Raio Volume Inicial (cm³)

---

000001 0.000000029880016  
 000002 0.000000049321108  
 000003 0.000000075766381  
 000004 0.000000110293402  
 000005 0.000000153979736

000006 0.000000207902950  
000007 0.000000273140611  
000008 0.000000350770284  
000009 0.000000441869536  
000010 0.000000547515933

+-----+

Somatório dos Volumes (cm<sup>3</sup>)  
(Volume Inicial \* Qtd Gotas de Cada Raio)

0.000271548

Massa Inicial da Gotícula (g)

Massa da Gotícula ( 1 , 1 ): 2.241001190101589E-08  
Massa da Gotícula ( 1 , 2 ): 3.699083106426137E-08  
Massa da Gotícula ( 1 , 3 ): 5.682478599994635E-08  
Massa da Gotícula ( 1 , 4 ): 8.272005144229230E-08  
Massa da Gotícula ( 1 , 5 ): 1.154848021255206E-07  
Massa da Gotícula ( 1 , 6 ): 1.559272127838528E-07  
Massa da Gotícula ( 1 , 7 ): 2.048554581515104E-07  
Massa da Gotícula ( 1 , 8 ): 2.630777129627147E-07  
Massa da Gotícula ( 1 , 9 ): 3.314021519516872E-07  
Massa da Gotícula ( 1 , 10 ): 4.106369498526495E-07  
Massa da Gotícula ( 2 , 1 ): 2.241001190101589E-08  
Massa da Gotícula ( 2 , 2 ): 3.699083106426137E-08  
Massa da Gotícula ( 2 , 3 ): 5.682478599994635E-08  
Massa da Gotícula ( 2 , 4 ): 8.272005144229230E-08  
Massa da Gotícula ( 2 , 5 ): 1.154848021255206E-07  
Massa da Gotícula ( 2 , 6 ): 1.559272127838528E-07  
Massa da Gotícula ( 2 , 7 ): 2.048554581515104E-07  
Massa da Gotícula ( 2 , 8 ): 2.630777129627147E-07  
Massa da Gotícula ( 2 , 9 ): 3.314021519516872E-07  
Massa da Gotícula ( 2 , 10 ): 4.106369498526495E-07

Pressão do Vapor de Água (atm)

0.031461

+-----+

Pressão Parcial da Água (atm)

0.028314

+-----+

Massa do Combustível (g)

2.036610370810349E-04

+-----+

Massa dos Compostos (g) e Número de Moles (mol)

Benzeno ..... 1.018305185405174E-04 .. 1.303614186196039E-06  
Ciclopentano .. 1.018305185405174E-04 .. 1.494891565356471E-06

+-----+

Pressão Parcial dos Compostos (atm)

-----

Benzeno ..... 0.1174542423532218  
Ciclopentano ... 0.1346881294085287

+-----+

Pressão Total.: 0.2521423717617505

Pressão de Vapor Parcial dos Compostos (atm)

Benzeno..... 0.1252212774704682  
Ciclopentano ... 0.4180250013306372

+-----+

Fração Volumétrica da Água

0.112296

+-----+

Massa Molar do Estado Gasoso

71.56212867704478

+-----+

Densidade do Estado Gasoso (g/cm³)

0.7375012603037797

+-----+

Difusividade Mássica dos Compostos

2.650845965965994E-14  
1.897942969715298E-14  
1.425566052808379E-14  
1.109869764297181E-14  
8.885106977337542E-15  
7.273296187797852E-15  
6.063371680186869E-15  
5.132037790110164E-15  
4.399895224717221E-15  
3.813940093720396E-15

+-----+

Volume da Câmara

4.713240201309914E-08

+-----+

Coef. de Transferência de Calor

7.148067435635009

+-----+

Calor Específico Estado Gasoso

132.5262362741932

+-----+

Calor Específico da Gasolina

132.4000000000000

Massa do Estado Gasoso

Massa do Gás.....: 5.712161828586380E-06

Massa do Vapor de Água: 5.656680641640376E-06

———— Término dos Cálculos Iniciais ————

Início da Resolução do Sistema

Tempo: 2.000000000000000E-04 s

Raio Adimensional( 1 ): 1.000000000000000

Varição da Massa da Gotícula: ( 1 , 1 ): 2.933357504679122E-13

Massa da Gotícula: ( 1 , 1 ): 5.866715009358244E-17

Varição da Massa da Gotícula: ( 2 , 1 ): 3.205447700207349E-12

Massa da Gotícula: ( 2 , 1 ): 6.410895400414697E-16

Varição da Temperatura da Gota( 1 ): -8.268773415971499E-13

Temperatura da Gota( 1 ) : 298.1499938964835

Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 3.417423652436199E-03

Massa do Vapor de Água: 5.657811977768704E-06

Massa de Gasolina Evaporada: 3.411710359271484E-03

Raio Adimensional( 2 ): 1.000000000000000

Varição da Massa da Gotícula: ( 1 , 2 ): 2.482071734728488E-13

Massa da Gotícula: ( 1 , 2 ): 4.964143469456976E-17

Varição da Massa da Gotícula: ( 2 , 2 ): 2.712301900175449E-12

Massa da Gotícula: ( 2 , 2 ): 5.424603800350899E-16

Varição da Temperatura da Gota( 2 ): -4.238756051372107E-13

Temperatura da Gota( 2 ) : 298.1499938964840

Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 3.234434790191101E-03

Massa do Vapor de Água: 5.658943540164258E-06

Massa de Gasolina Evaporada: 3.228720365463991E-03

Raio Adimensional( 3 ): 1.000000000000000

Varição da Massa da Gotícula: ( 1 , 3 ): 2.151128836764689E-13

Massa da Gotícula: ( 1 , 3 ): 4.302257673529379E-17

Varição da Massa da Gotícula: ( 2 , 3 ): 2.350661646818723E-12

Massa da Gotícula: ( 2 , 3 ): 4.701323293637446E-16

Varição da Temperatura da Gota( 3 ): -2.391370105347926E-13

Temperatura da Gota( 3 ) : 298.1499938964841

Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 3.085509233584420E-03

Massa do Vapor de Água: 5.660075328872291E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 3.079793677068602E-03  
Raio Adimensional( 4 ): 1.000000000000000  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 4 ): 1.898054855968844E-13  
Massa da Gotícula: ( 1 , 4 ): 3.796109711937688E-17  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 4 ): 2.074113217781226E-12  
Massa da Gotícula: ( 2 , 4 ): 4.148226435562452E-16

Variação da Temperatura da Gota( 4 ): -1.449493080581395E-13  
Temperatura da Gota( 4 ) : 298.1499938964842  
Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 2.960894339909544E-03  
Massa do Vapor de Água: 5.661207343938066E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 2.955177651378660E-03  
Raio Adimensional( 5 ): 1.000000000000000  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 5 ): 1.698259607972123E-13  
Massa da Gotícula: ( 1 , 5 ): 3.396519215944246E-17  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 5 ): 1.855785510646360E-12  
Massa da Gotícula: ( 2 , 5 ): 3.711571021292719E-16

Variação da Temperatura da Gota( 5 ): -9.289608856841082E-14  
Temperatura da Gota( 5 ) : 298.1499938964843  
Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 2.854393769442096E-03  
Massa do Vapor de Água: 5.662339585406854E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 2.848675948669743E-03  
Raio Adimensional( 6 ): 1.000000000000000  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 6 ): 1.536520597689064E-13  
Massa da Gotícula: ( 1 , 6 ): 3.073041195378128E-17  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 6 ): 1.679044033441945E-12  
Massa da Gotícula: ( 2 , 6 ): 3.358088066883890E-16

Variação da Temperatura da Gota( 6 ): -6.224932594096018E-14  
Temperatura da Gota( 6 ) : 298.1499938964843  
Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 2.761846865278304E-03  
Massa do Vapor de Água: 5.663472053323935E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 2.756127912038034E-03  
Raio Adimensional( 7 ): 1.000000000000000  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 7 ): 1.402910110933493E-13  
Massa da Gotícula: ( 1 , 7 ): 2.805820221866987E-17  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 7 ): 1.533040204446993E-12  
Massa da Gotícula: ( 2 , 7 ): 3.066080408893987E-16

Variação da Temperatura da Gota( 7 ): -4.326139185581766E-14  
Temperatura da Gota( 7 ) : 298.1499938964843  
Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 2.680336775015787E-03  
Massa do Vapor de Água: 5.664604747734600E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 2.674616689081106E-03  
Raio Adimensional( 8 ): 1.000000000000000  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 8 ): 1.290677302058813E-13

Massa da Gotícula: ( 1 , 8 ): 2.581354604117627E-17  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 8 ): 1.410396988091233E-12  
Massa da Gotícula: ( 2 , 8 ): 2.820793976182467E-16

Variação da Temperatura da Gota( 8 ): -3.099215656530910E-14  
Temperatura da Gota( 8 ) : 298.1499938964843  
Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 2.607746625285974E-03  
Massa do Vapor de Água: 5.665737668684146E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 2.602025406430344E-03  
Raio Adimensional( 9 ): 1.000000000000000  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 9 ): 1.195071575980383E-13  
Massa da Gotícula: ( 1 , 9 ): 2.390143151960767E-17  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 9 ): 1.305923137121513E-12  
Massa da Gotícula: ( 2 , 9 ): 2.611846274243026E-16

Variação da Temperatura da Gota( 9 ): -2.278016027804380E-14  
Temperatura da Gota( 9 ) : 298.1499938964844  
Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 2.542495856304581E-03  
Massa do Vapor de Água: 5.666870816217883E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 2.536773504301417E-03  
Raio Adimensional( 10 ): 1.000000000000000  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 10 ): 1.112652846602425E-13  
Massa da Gotícula: ( 1 , 10 ): 2.225305693204851E-17  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 10 ): 1.215859472492443E-12  
Massa da Gotícula: ( 2 , 10 ): 2.431718944984886E-16

Variação da Temperatura da Gota( 10 ): -1.711669217513813E-14  
Temperatura da Gota( 10 ) : 298.1499938964844  
Temperatura do Gás: 298.1499938964844

Massa do Gás: 2.483375988565893E-03  
Massa do Vapor de Água: 5.668004190381127E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 2.477652503188565E-03

.... até o tempo de integração .....

Tempo: 5.199999999999999E-03 s \_\_\_\_\_

Raio Adimensional( 1 ): 1.304891136734784E-18  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 1 ): 3.350828007109701E-22  
Massa da Gotícula: ( 1 , 1 ): 1.742430563697044E-24  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 1 ): 3.661641621263994E-21  
Massa da Gotícula: ( 2 , 1 ): 1.904053643057277E-23

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 6.078799096681196E-30  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 7.617318291937437E-29

Variação da Temperatura da Gota( 1 ): 0.5805723724273524  
Temperatura da Gota( 1 ) : 282.9216105605859  
Massa do Gás: 1.733137215699768E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 1.119394108175042E-05  
Raio Adimensional( 2 ): 6.722600380610949E-19  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 2 ): 2.035086984884546E-22



Massa da Gotícula: ( 1 , 2 ): 1.058245232139964E-24  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 2 ): 2.223856071077045E-21  
Massa da Gotícula: ( 2 , 2 ): 1.156405156960063E-23

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 2.942537215233876E-30  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 3.687281352421240E-29

Variação da Temperatura da Gota( 2 ): 0.5805144954629096  
Temperatura da Gota( 2 ) : 282.9263610741958  
Massa do Gás: 1.563287320063456E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 9.495442125387297E-06  
Raio Adimensional( 3 ): 3.808910981968561E-19  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 3 ): 1.327598746397587E-22  
Massa da Gotícula: ( 1 , 3 ): 6.903513481267449E-25  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 3 ): 1.450743164326237E-21  
Massa da Gotícula: ( 2 , 3 ): 7.543864454496430E-24

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 1.508697211722493E-30  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 1.890542306970317E-29

Variação da Temperatura da Gota( 3 ): 0.5804650895309544  
Temperatura da Gota( 3 ) : 282.9303851611261  
Massa do Gás: 1.438440955750818E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 8.246978482260908E-06  
Raio Adimensional( 4 ): 2.317356145886387E-19  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 4 ): 9.137032125892205E-23  
Massa da Gotícula: ( 1 , 4 ): 4.751256705463946E-25  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 4 ): 9.984558161745668E-22  
Massa da Gotícula: ( 2 , 4 ): 5.191970244107746E-24

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 7.857556758346897E-31  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 9.846272244458659E-30

Variação da Temperatura da Gota( 4 ): 0.5804220077890614  
Temperatura da Gota( 4 ) : 282.9338713619805  
Massa do Gás: 1.342778318355223E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 7.290352108304966E-06  
Raio Adimensional( 5 ): 1.490101976671203E-19  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 5 ): 6.555594402190008E-23  
Massa da Gotícula: ( 1 , 5 ): 3.408909089138803E-25  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 5 ): 7.163673356033976E-22  
Massa da Gotícula: ( 2 , 5 ): 3.725110145137666E-24

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 4.042920833215602E-31  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 5.066167564662856E-30

Variação da Temperatura da Gota( 5 ): 0.5803838266188790  
Temperatura da Gota( 5 ) : 282.9369436640645  
Massa do Gás: 1.267121528922728E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 6.533784213980008E-06  
Raio Adimensional( 6 ): 1.001499401319279E-19  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 6 ): 4.862546120111143E-23

Massa da Gotícula: ( 1 , 6 ): 2.528523982457794E-25  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 6 ): 5.313582559575344E-22  
Massa da Gotícula: ( 2 , 6 ): 2.763062930979178E-24

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 2.015494411317283E-31  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 2.525607805496781E-30

Variação da Temperatura da Gota( 6 ): 0.5803495536620255  
Temperatura da Gota( 6 ) : 282.9396878805317  
Massa do Gás: 1.205778721655102E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 5.920356141303752E-06  
Raio Adimensional( 7 ): 6.979043153489662E-20  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 7 ): 3.706190914670029E-23  
Massa da Gotícula: ( 1 , 7 ): 1.927219275628415E-25  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 7 ): 4.049967017319957E-22  
Massa da Gotícula: ( 2 , 7 ): 2.105982849006378E-24

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 9.598718638815060E-32  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 1.202811507728981E-30

Variação da Temperatura da Gota( 7 ): 0.5803184696896961  
Temperatura da Gota( 7 ) : 282.9421658200799  
Massa do Gás: 1.155031817472041E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 5.412887099473140E-06  
Raio Adimensional( 8 ): 5.012197196355740E-20  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 8 ): 2.889560202549930E-23  
Massa da Gotícula: ( 1 , 8 ): 1.502571305325963E-25  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 8 ): 3.157587880474718E-22  
Massa da Gotícula: ( 2 , 8 ): 1.641945697846853E-24

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 4.321100105770571E-32  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 5.414752873630823E-31

Variação da Temperatura da Gota( 8 ): 0.5802900368576231  
Temperatura da Gota( 8 ) : 282.9444234496663  
Massa do Gás: 1.112348847948818E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 4.986057404240911E-06  
Raio Adimensional( 9 ): 3.692587944044658E-20  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 9 ): 2.296462409043814E-23  
Massa da Gotícula: ( 1 , 9 ): 1.194160452702783E-25  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 9 ): 2.509475962592347E-22  
Massa da Gotícula: ( 2 , 9 ): 1.304927500548020E-24

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 1.823861600772598E-32  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 2.285473514186781E-31

Variação da Temperatura da Gota( 9 ): 0.5802638424910143  
Temperatura da Gota( 9 ) : 282.9464958648707  
Massa do Gás: 1.075945701810281E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06  
Massa de Gasolina Evaporada: 4.622025942855542E-06  
Raio Adimensional( 10 ): 2.780483382550020E-20  
Variação da Massa da Gotícula: ( 1 , 10 ): 1.855324310852926E-23

Massa da Gotícula: ( 1 , 10 ): 9.647686416435210E-26  
Variação da Massa da Gotícula: ( 2 , 10 ): 2.027419104516157E-22  
Massa da Gotícula: ( 2 , 10 ): 1.054257934348401E-24

Variação da Pressão do Composto( 1 ): 7.171855181540617E-33  
Variação da Pressão do Composto( 2 ): 8.987022402385658E-32

Variação da Temperatura da Gota( 10 ): 0.5802395630750171  
Temperatura da Gota( 10 ) : 282.9484104560605

Massa do Gás: 1.044528869386397E-05  
Massa do Vapor de Água: 6.078229109248576E-06

Massa de Gasolina Final Evaporada: 4.307857618616699E-06

Alfa: -5.320857836690584E-08  
Beta: 0.000000000000000  
Gama: 0.000000000000000

Variação da Temperatura do Gás: -5.320857836690584E-08  
Nova Temperatura do Gás: 277.9586513868765

# Apêndice E

## Programa Fonte

```
C      Last change: MFM  1 Mar 2005   5:31 am
!      Last change: MFM  1 Mar 2005   5:16 am
!      SISTEMA DE ANÁLISE DE COMBUSTÍVEIS
!      MFM  19 Jan 2005   1:25 pm
!      06/Jan/2005 15:15:22
! Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia MINTER Unicentro UFPR

module utilities_module
contains
  subroutine mypause()
    print *, ""
    call system("PAUSE")
  end subroutine mypause
end module utilities_module

program sac

  implicit none
  integer ::selection, ncomp, codigo
  CHARACTER(LEN=1)::resp
  CHARACTER(LEN=50)::nome
  logical :: toggle
131  open (10, FILE='Resulta.dat')
    open (20, FILE='Finais.dat')
    open (30, FILE='RungeKutta.dat')
    open (40, FILE='graficos.dat')
    open (100,FILE='Benzeno.dat')
    open (200,FILE='Ciclopentano.dat')
    open (300,FILE='Decano.dat')
    open (400,FILE='MTBE.dat')
    open (500,FILE='Metanol.dat')
    open (600,FILE='Octano.dat')
    open (700,FILE='Tolueno.dat')

  toggle = .false.

  call system("cls")
  print *, "++ "
  print *, "|          Programa Para Análise de Combustíveis          |"
  print *, "|                                |"
  print *, "|  Modelo para Prever a Vaporização em Antecômaras de Combustão  |"
  print *, "|                                |"
  print *, "|          Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia          |"
  print *, "|          MINTER UNICENTRO UFPR 2005          |"
  print *, "|                                |"
  print *, "|          Mestrando: Marcos Freitas de Moraes          |"
  print *, "|          Orientadora: Profª Dra. Lilliana Gramani Cumin      |"
  print *, "++"

  if (toggle) then
```

```

!

end select
close (10)
close (20)
close (30)
close (40)
close (100)
close (200)
close (300)
close (400)
close (500)
close (600)
close (700)
call system('notepad.exe resulta.dat')
call system('notepad.exe finais.dat')
go to 131
end program sac

!
subroutine calculo(m,compostos,nome)

implicit none

!Declaração das Variáveis Globais
REAL(KIND=8):: a, b, y0, t1, t2, np1, pi, w1, w2, w3, soma_vol_ini, Boltzmann,
Avogrado
REAL(KIND=8):: raiom, sigma, soma, rmg, diam, tfs, tfs1, tfs2, dt, pressao_ini,
temp_ini, umid_ini
REAL(KIND=8):: somal, x, y, k1, k2, k3, k4, dx2, dy2, dx3, dy3, dx4, dy4, tes
REAL(KIND=8), DIMENSION(10000):: raio, ncr, V0
INTEGER::n, j, i=1, m, nequ, lei, z, t, l
INTEGER:: compostos, pass
REAL(KIND=8), DIMENSION(10):: tal
character(len=8) :: date_result, test, lido, jeito
CHARACTER(LEN=50):: nome
CHARACTER(LEN=13), DIMENSION(10):: nome_composto
!Declaração das Variáveis FísicoQuímicas
REAL(KIND=8):: ro_gsl, massamol_ar, p_h2o, r_gas, p_h2o, p_vap_h2o, temp_gas_ini,
testar, alfa, beta, gama
REAL(KIND=8):: p_total, h, cp_gas, cp_comp, transf_calor, massa_vap_h2o, frac_h2o,
dfrac_h2o, temp_fim
REAL(KIND=8):: cp_gsl, vol_camara, vol_cam_ini, temp_k, massa_ar, massa_gas,
massamol_h2o, dtemp_gas
REAL(KIND=8):: massa_gsl, massa_gasoso, dens_gasoso, calor_esp_gas, calor_esp_gsl
REAL(KIND=8):: calor_vap_h2o, dmassa_vh2o, n_total, dn_total, umidade, massa_evap
REAL(KIND=8), DIMENSION(10):: massa_comp, num_moles, p_parcomp, p_vap_comp,
calor_vap, dp_t
REAL(KIND=8), DIMENSION(10000):: massa_mol, density, const_A, Const_B, Const_C,
calor_esp, soma_massas
REAL(KIND=8), DIMENSION(10000):: d_eta, raion, eta, partel, parte2, parte3, d_temp,
temp_gota, temp_gas
REAL(KIND=8), DIMENSION(10,10000):: difus_mass, dmassa_gota, massa_gota
REAL(KIND=8), DIMENSION(10,10000):: massa_ini

INTEGER :: IVALUE
CHARACTER(LEN=7) :: STRING
CHARACTER(LEN=7) :: FRMAT

!Definição das Constantes FísicoQuímicas
pi = 3.1415926535898
ro_gsl = 0.75
massamol_ar = 16.0
massamol_h2o = 18.0
r_gas = 0.08206
Avogrado = 6.023*(10.0**(23))
Boltzmann = 1.3805*(10.0**(16))
calor_vap_h2o = 0.009718

!Array dos Compostos
nome_composto(1)= 'Benzeno'
nome_composto(2)= 'Ciclopentano'
nome_composto(3)= 'Decano'
nome_composto(4)= 'MTBE'
nome_composto(5)= 'Metanol'
nome_composto(6)= 'Octano'

```

```

nome_composto(7) = 'Tolueno'

call system("cls")

!!
! Solicitando os Dados de Entrada!
!!

WRITE(*,*) 'Composto(s) Selecionado(s).....: ', TRIM(nome),' ', compostos
write(*,*) ' '
WRITE(*,*) 'Entre com o Raio Múdio Inicial das Gotas (Åm).....: '
READ(*,*) raio_m
WRITE(*,*) 'Entre com o N.mero de Raios ou de DiÔmetros das Gotas: '
READ(*,*) n
WRITE(*,*) 'Entre com o Tempo Final de SimulaçÕo (em mil. s.).....: '
READ(*,*) tfs
WRITE(*,*) 'Entre com a Pressõo Inicial (atm).....: '
READ(*,*) pressao_ini
WRITE(*,*) 'Entre com a Temperatura Inicial (°C).....: '
READ(*,*) temp_ini
WRITE(*,*) 'Entre com a Umidade Inicial (%).....: '
READ(*,*) umid_ini
WRITE(*,*) ' '

if (m==1) then
  i=compostos
  write (*,*) 'Entre com a FraçÕo Mássica do ',nome_composto(i),' em %..: '
  READ(*,*) tal(i)
else
  do i=1,m
    write (*,*) 'Entre com a FraçÕo Mássica do ',nome_composto(i),' em %..: '
    READ(*,*) tal(i)
  end do
endif
WRITE(*,*) ' '

WRITE(*,*) 'AGUARDE... PROCESSANDO '

!!
! Leitura dos Dados
!!
if (m==1) then
  i=compostos
  lei = i*100
  READ(lei,*) massa_mol(i)
  READ(lei,*) const_A(i)
  READ(lei,*) const_B(i)
  READ(lei,*) const_C(i)
  READ(lei,*) calor_esp(i)
  READ(lei,*) calor_vap(i)
else
  do i=1,m
    lei = i*100
    READ(lei,*) massa_mol(i)
    READ(lei,*) const_A(i)
    READ(lei,*) const_B(i)
    READ(lei,*) const_C(i)
    READ(lei,*) calor_esp(i)
    READ(lei,*) calor_vap(i)
  end do
end if

!!
! Conver. de Temperatura °C > K !
!!
temp_k = temp_ini+273.15

WRITE(10,*)"++"
WRITE(10,*)" | Programa Para Análise de Combustíveis | "
WRITE(10,*)" | | "
WRITE(10,*)" | Modelo para Prever a VaporizaçÕo | "
WRITE(10,*)" | em Antecômaras de Combustõo | "
WRITE(10,*)" | | "
WRITE(10,*)" | Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia | "
```

```

WRITE(10,*)"| MINTER UNICENTRO UFPR 2005 |"
WRITE(10,*)"| |"
WRITE(10,*)"| Mestrando: Marcos Freitas de Moraes |"
WRITE(10,*)"| Orientadora: Profa Dra. Liliana Gramani Cumin |"
WRITE(10,*)"++"
call date_and_time (date=date_result)
WRITE(10,*) " "
",date_result(7:8),"/",date_result(5:6),"/",date_result(1:4)
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Dados de Entrada"
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,8) raio_m
8 format (' Raio Múdio Inicial.....: ',f8.4, ' Åm')
WRITE(10,9) n
9 format (' N.mero de Raios ou Diômetros.....: ',i4.4)
WRITE(10,*) 'Composto(s) Selecionado(s).....: ', TRIM(nome)
WRITE(10,11) pressao_ini
11 format (' Pressão Inicial.....: ',f6.2,' atm')
WRITE(10,12) temp_ini, temp_k
12 format (' Temperatura Inicial.....: ',f6.2,' °C > ',f6.2, ' K')
WRITE(10,13) umid_ini
13 format (' Umidade Inicial.....: ',f6.2,' %')
WRITE(10,18) tfs
18 format (' Tempo Final de Simulação.....: ',f14.8,' mil.s.')
WRITE(10,*) " "

WRITE(20,*)"++"
WRITE(20,*)"| Programa Para Análise de Combustíveis |"
WRITE(20,*)"| |"
WRITE(20,*)"| Modelo para Prever a Vaporização |"
WRITE(20,*)"| em Antecômaras de Combustão |"
WRITE(20,*)"| Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia |"
WRITE(20,*)"| MINTER UNICENTRO UFPR 2005 |"
WRITE(20,*)"| |"
WRITE(20,*)"| Mestrando: Marcos Freitas de Moraes |"
WRITE(20,*)"| Orientadora: Profa Dra. Liliana Gramani Cumin |"
WRITE(20,*)"++"
WRITE(20,*) " "
",date_result(7:8),"/",date_result(5:6),"/",date_result(1:4)
WRITE(20,*) " "
WRITE(20,*) "Dados de Entrada"
WRITE(20,*) " "
WRITE(20,*) " "
WRITE(20,30) raio_m
30 format (' Raio Múdio Inicial.....: ',f8.4, ' Åm')
WRITE(20,31) n
31 format (' N.mero de Raios ou Diômetros.....: ',i4.4)
WRITE(20,*) 'Composto(s) Selecionado(s).....: ', TRIM(nome)
WRITE(20,32) pressao_ini
32 format (' Pressão Inicial.....: ',f6.2,' atm')
WRITE(20,33) temp_ini, temp_k
33 format (' Temperatura Inicial.....: ',f6.2,' °C > ',f6.2, ' K')
WRITE(20,34) umid_ini
34 format (' Umidade Inicial.....: ',f6.2,' %')
WRITE(20,35) tfs
35 format (' Tempo Final de Simulação.....: ',f14.8,' mil.s.')
WRITE(20,*) " "

!!
! N.mero de Equações Diferenciais!
!!
nequ = 2*n+m+4
WRITE(10,6) nequ
6 format (' N.meros de Equações Diferenciais: ',i6.6)

!!
! N.mero de pontos de Integração !
!!
npi = 250000/(2*n+m+4)
WRITE(10,1) npi
1 format (' N.meros de Pontos de Integração.: ',F6.0)

!!

```

```

!!
! Intervalo de Integração dt      !
!!
dt = tfs/(nequ 1)
WRITE(10,2) dt
2 format (' Intervalo de Integração.....: ',f13.8,' mil. s.')
WRITE(10,*) " "

!!
! Fração Mássica dos Compostos  !
!!
if (m==1) then
  i=compostos
  write(10,*) 'Fração Mássica do ',nome_composto(i),' em %..: ',tal(i)
else
  do i=1,m
    write(10,*) 'Fração Mássica do ',nome_composto(i),' em %..: ',tal(i)
  end do
end if

!!
! Medida dos raios                !
!!
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Medida de Cada Raio em Åm"
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "

do j=1,n
  raio(j) = ((n/2)+j0.5)*(raiom/n)
  WRITE(10,3) j,raio(j)
  3 format (' Raio(',I6.6,') = ',f12.8)

end do

!!
! Calculando o Desvio Padrão      !
!!

soma=0
do j = 1,n
  soma = soma + (2*(raio(j)) (2*raiom))**2
end do

sigma = SQRT(soma/(n1))

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,5) sigma
5 format ('O Desvio Padrão Ú: ',f7.3, ' %')
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "

!!
! Distribuição Normal das Gotas    !
!!

WRITE(10,*) "Distribuição dos Raios (Åm) "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
soma=0
do j=1,n
  ncr(j)= ((1.0/(SQRT(2.0*pi)*sigma))*EXP(0.50*(((2*raio(j))(2*raiom))**2)/(sigma**2)))*10000
  WRITE(10,4) j, raio(j), ncr(j)
  4 format (' Raio(',I6.6,') = ',f12.8, ' > Quantidade de Gotas = ',f8.0)
  soma = soma + ncr(j)
end do
WRITE(10,*) '++'
WRITE(10,7) soma
7 format ('                               N.mero Total de Gotas = ',f8.0)
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "

!!
! Volume Inicial de Cada Gota      !
!!

```



```

WRITE(10,*) "Volume das Gotas"
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Raio          Volume Inicial (cm|)"
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
soma_vol_ini = 0
do j=1,n

    V0(j)= (((4.0/3.0)*pi*((raio(j)/1000)**3)))/1000
    WRITE(10,10) j, V0(j)
    10 format (' ',I6.6,' ',f20.15)
    soma_vol_ini = soma_vol_ini + (v0(j)*ncr(j))
end do
WRITE(10,*) '++'
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "          Somatório dos Volumes (cm|)"
write(10,*) "(Volume Inicial * Qtd Gotas de Cada Raio) "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,16) soma_vol_ini
16 format (' ',f20.9)
WRITE(10,*) " "

!!
! Massa Inicial de cada Cada Gota!
!!

WRITE(10,*) "Massa Inicial da Gotícula (g)"
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
soma_massas(j)=0.0
if (m==1) then
    i=compostos
    do j=1,n
        massa_ini(i,j)= v0(j)*ro_gsl
        WRITE(10,*) 'Massa da Gotícula (' ,i,',',j,') : ',massa_ini(i,j)
        soma_massas(j) = soma_massas(j) + massa_ini(i,j)
    end do
else
do i=1,m
    do j=1,n
        massa_ini(i,j)= v0(j)*ro_gsl
        WRITE(10,*) 'Massa da Gotícula (' ,i,',',j,') : ',massa_ini(i,j)
        soma_massas(j) = soma_massas(j) + massa_ini(i,j)
    end do
end do
endif
WRITE(10,*) " "

!!
! Pressão do Vapor de Água          !
!!
p_vap_h2o = 16.3872 (3885.70/(temp_ini +230.170))
p_vap_h2o = ((EXP(p_vap_h2o))*1000.00)/101325.00

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Pressão do Vapor de Água (atm) "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,14) p_vap_h2o
14 format (' ',f12.6)
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Pressão Parcial da Água          !
!!
p_h2o = (umid_ini*p_vap_h2o)/100

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Pressão Parcial da Água (atm)"
WRITE(10,*) " "

```

```

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,15) p_h2o
15 format (' ',f12.6)
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Massa de Gasolina          !
!!
massa_gsl = ro_gsl*soma_vol_ini

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Massa do Combustível (g) "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) massa_gsl
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Massa dos Compostos      !
!!

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Massa dos Compostos (g) e Número de Moles (mol) "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
n_total = 0
if (m==1) then
  i=compostos
  massa_comp(i) = massa_gsl*tal(i)/100
  num_moles(i)=massa_comp(i)/massa_mol(i)
  write(10,*) nome_composto(i), '.. ',massa_comp(i),' .. ',num_moles(i)
  n_total = n_total + num_moles(i)
else
  do i=1,m
    massa_comp(i) = massa_gsl*tal(i)/100
    num_moles(i)=massa_comp(i)/massa_mol(i)
    write(10,*) nome_composto(i), '.. ',massa_comp(i),' .. ',num_moles(i)
    n_total = n_total + num_moles(i)
  end do
endif
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Pressão Parcial dos Compostos !
!!

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Pressão Parcial dos Compostos (atm) "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
p_total = 0
if (m==1) then
  i=compostos
  p_parcomp(i) = (num_moles(i)*r_gas*temp_K)/soma_vol_ini
  write(10,*) nome_composto(i), '... ',p_parcomp(i)
  p_total = p_total + p_parcomp(i)
else
  do i=1,m
    p_parcomp(i) = (num_moles(i)*r_gas*temp_K)/soma_vol_ini
    write(10,*) nome_composto(i), '... ',p_parcomp(i)
    p_total = p_total + p_parcomp(i)
  end do
endif
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) 'Pressão Total.: ',p_total
WRITE(10,*) " "

!!
! Pressão de Vapor Parcial dos Compostos !
!!

```

```

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Pressão de Vapor Parcial dos Compostos (atm)"
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
if (m==1) then
  i=compostos
  p_vap_comp(i) = const_A(i) (const_B(i)/(temp_ini + const_C(i)))
  p_vap_comp(i) = (EXP(p_vap_comp(i))*1000.00)/101325.00
  write(10,*) nome_composto(i), '... ',p_vap_comp(i)
else
do i=1,m
  p_vap_comp(i) = const_A(i) (const_B(i)/(temp_ini + const_C(i)))
  p_vap_comp(i) = (EXP(p_vap_comp(i))*1000.00)/101325.00
  write(10,*) nome_composto(i), '... ',p_vap_comp(i)
end do
endif
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Fração Volumétrica da Água !
!!
frac_h2o = (umid_ini*p_vap_h2o)/(100*p_total)

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Fração Volumétrica da Água"
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,20) frac_h2o
20 format (' ',f12.6)
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Massa Molar do Estado Gasoso !
!!

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Massa Molar do Estado Gasoso"
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
soma = 0
if (m==1) then
  i=compostos
  soma = soma + (p_parcomp(i)/p_total)*(massa_mol(i)massamol_ar)
else
do i=1,m
  soma = soma + (p_parcomp(i)/p_total)*(massa_mol(i)massamol_ar)
end do
endif
massa_gasoso = massamol_ar + (18 massamol_ar)*(p_h2o/p_total)+soma
write(10,*) massa_gasoso
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Densidade do Estado Gasoso !
!!

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Densidade do Estado Gasoso (g/cm³)"
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "

dens_gasoso = ((p_total*massa_gasoso)/(r_gas*temp_k))
write(10,*) dens_gasoso
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Difusividade Mássica dos Comps.!
!!

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Difusividade Mássica dos Compostos"
WRITE(10,*) " "

```

```

WRITE(10,*) " "
if (m==1) then
  i=compostos
  do j=1,n
    difus_mass(i,j) = (2.0/3.0)*SQRT((Boltzmann**3)/((pi**3)*massa_comp(i)))* &
      & ((temp_k**(3.0/2.0))/(p_total*(2*raio(j)/10000)**2))
  end do
else
  do i=1,m
    do j=1,n
      difus_mass(i,j) = (2.0/3.0)*SQRT((Boltzmann**3)/((pi**3)*massa_comp(i)))* &
        & ((temp_k**(3.0/2.0))/(p_total*(2*raio(j)/10000)**2))
    end do
  end do
endif
do j=1,n
  WRITE(10,*) difus_mass(1,j)
end do
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Volume da C mara
!!

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Volume da C mara"
WRITE(10,*) ""
WRITE(10,*) " "
soma = 0
if (m==1) then
  i=compostos
  soma = soma + num_moles(i)*(tal(i)/massa_mol(i))
else
  do i=1,m
    soma = soma + num_moles(i)*(tal(i)/massa_mol(i))
  end do
endif
vol_cam_ini = ((massa_gsl*r_gas*temp_k)/(pressao_ini*0.21))*soma
vol_camara = (vol_cam_ini*(1+(p_h2o/pressao_ini)))
write(10,*) vol_camara
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Coef. de Transfer ncia de Calor!
!!

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Coef. de Transfer ncia de Calor"
WRITE(10,*) ""
WRITE(10,*) " "
transf_calor = (13.20 0.0313*(370 temp_k))*((temp_k/370)**(2.0 0.0372*((temp_k/370)**2)))
write(10,*) transf_calor
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! C lculo do Calor Espec fico G s!
!!

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Calor Espec fico Estado Gasoso"
WRITE(10,*) ""
WRITE(10,*) " "
soma = 0
if (m==1) then
  i=compostos
  soma = soma + (p_parco_comp(i)/p_total)*calor_esp(i)
else
  do i=1,m
    soma = soma + (p_parco_comp(i)/p_total)*calor_esp(i)
  end do
endif
calor_esp_gas = 0.26 + (p_h2o/p_total) + soma
write(10,*) calor_esp_gas
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

```

```

!!
! Calor Específico da Gasolina      !
!!

WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Calor Específico da Gasolina "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
soma = 0
if (m==1) then
  i=compostos
  soma = soma + ((tal(i)/100)*calor_esp(i))
else
do i=1,m
  soma = soma + ((tal(i)/100)*calor_esp(i))
end do
endif
calor_esp_gsl = soma
write(10,*) calor_esp_gsl
WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

!!
! Cálculo Massa do Estado Gasoso !
!!
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) "Massa do Estado Gasoso "
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "
massa_ar = (pressao_ini*vol_camara*massamol_ar)/(temp_k*r_gas)
massa_vap_h2o = massamol_h2o*frac_h2o*n_total
soma = 0
if (m==1) then
  i=compostos
  soma = soma + (ncr(i)*raio(j))
else
do i=1,m
  soma = soma + (ncr(i)*raio(j))
end do
endif
massa_gas = massa_ar + massa_vap_h2o + ((4.0/3.0)*pi*ro_gsl)*soma

write(10,*) 'Massa do Gás: ',massa_gas
write(10,*) 'Massa do Vapor de Água: ',massa_vap_h2o

WRITE(10,*) "++"
WRITE(10,*) " "

! Término dos Cálculos Inicias

Write (10,*) 'Término dos Cálculos Inicias '
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) " "

!!
! Início da Resolução do Sistema      !
!!

Write (10,*) '!'
Write (10,*) '| Início da Resolução do Sistema      !'
Write (10,*) '!'
WRITE(10,*) " "

do j=1,n
  temp_gota(j)=temp_k
end do
umidade = umid_ini
tfs2=dt/1000.0

do t = 1,nequ

  WRITE(10,*) "Tempo: ",tfs2,' s'
  WRITE(10,*) " "
  WRITE(10,*) " "

```

```

if (t == 1) then
do j=1,n
umidade = umidade + umidade*tfs2
p_h2o = (umidade*p_vap_h2o)/100
frac_h2o = (umidade*p_vap_h2o)/(100*p_total)
soma = 0

if (m==1) then
i=compostos
soma = soma + (difus_mass(i,j)*((p_parcomp(i)/p_vapcomp(i)) 1.0))
else
do i=1,m
soma = soma + (difus_mass(i,j)*((p_parcomp(i)/p_vapcomp(i)) 1.0))
end do
endif
d_eta(j) = ((2.0*dens_gasoso)/((raio(j)**2.0)*ro_gsl))*soma
eta(j) = 1
WRITE(10,*) 'Raio Adimensional(' ,j, '): ',eta(j)

soma = 0
if (m==1) then
i=compostos
if ((p_parcomp(i)/p_vapcomp(i)) > 1) then
dmassa_gota(i,j) =
4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((p_parcomp(i)/p_vapcomp(i))1.0)
massa_gota(i,j) =
4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((p_parcomp(i)/p_vapcomp(i))1.0)*tfs
2
else
dmassa_gota(i,j) = 4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((1
p_parcomp(i)/p_vapcomp(i)))
massa_gota(i,j) = 4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((1
p_parcomp(i)/p_vapcomp(i)))*tfs2
end if
WRITE(10,*) 'Variapão da Massa da Gotícula: (' ,i, ' ,',j, '): ',dmassa_gota(i,j)
WRITE(10,*) 'Massa da Gotícula: (' ,i, ' ,',j, '): ',massa_gota(i,j)
soma = soma + massa_gota(i,j)
else
do i=1,m
if ((p_parcomp(i)/p_vapcomp(i)) > 1) then
dmassa_gota(i,j) =
4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((p_parcomp(i)/p_vapcomp(i))1.0)
massa_gota(i,j) =
4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((p_parcomp(i)/p_vapcomp(i))1.0)*tfs
2
else
dmassa_gota(i,j) = 4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((1
p_parcomp(i)/p_vapcomp(i)))
massa_gota(i,j) = 4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((1
p_parcomp(i)/p_vapcomp(i)))*tfs2
end if
WRITE(10,*) 'Variapão da Massa da Gotícula: (' ,i, ' ,',j, '): ',dmassa_gota(i,j)
WRITE(10,*) 'Massa da Gotícula: (' ,i, ' ,',j, '): ',massa_gota(i,j)
soma = soma + massa_gota(i,j)
end do
endif
raion(j) = (soma/((4.0/3.0)*ro_gsl*pi))*0.33

WRITE(10,*) " "
if (m==1) then
i=compostos
dp_t(i) = 0.0
WRITE(10,*) 'Variapão da Pressão do Composto(' ,i, '): ',dp_t(i)
else
do i = 1,m
dp_t(i) = 0.0
WRITE(10,*) 'Variapão da Pressão do Composto(' ,i, '): ',dp_t(i)
end do
endif

soma = 0
if (m==1) then
i=compostos
soma = soma + ((calor_vap(i)*0.23901)*dmassa_gota(i,j))
else

```

```

do i=1,m
    soma = soma + ((calor_vap(i)*0.23901)*dmassa_gota(i,j))
end do
endif
partel(j) = ((3.0*transf_calor)/(ro_gsl*calor_esp_gsl*raio(j)))*(temp_gota(j)
temp_k )

parte2(j) = ((3.0*temp_gota(j))/(2.0*eta(j)))*d_eta(j)
parte3(j) = (1/(calor_esp_gsl*soma_massas(j)))*soma

d_temp(j) = (partel(j)+(parte2(j))/10*tfs2)+parte3(j)*tfs2
if (d_temp(j) > 0) then
    temp_gota(j) = temp_gota(j) d_temp(j)
else
    temp_gota(j) = temp_gota(j) + d_temp(j)
end if

WRITE(10,*) 'Variação da Temperatura da Gota(',j,'): ',d_temp(j)
WRITE(10,*) 'Temperatura da Gota(',j,') : ',temp_gota(j)
WRITE(10,*) " "
WRITE(10,*) 'Temperatura do Gás: ',temp_k
WRITE(10,*) " "

massa_ar = (pressao_ini*vol_camara*massamol_ar)/(temp_k*r_gas)
massa_vap_h2o = massamol_h2o*frac_h2o*n_total
soma = 0
if (m==1) then
    i=compostos
    soma = soma + (ncr(i)*raion(j))
else
do i=1,m
    soma = soma + (ncr(i)*raion(j))
end do
endif
massa_evap = ((4.0/3.0)*pi*ro_gsl)*soma
massa_gas = massa_ar + massa_vap_h2o + massa_evap

write(10,*) 'Massa do Gás: ',massa_gas
write(10,*) 'Massa do Vapor de água: ',massa_vap_h2o
write(10,*) 'Massa de Gasolina Evaporada: ',massa_evap
if (umidade < 100) then
    dmassa_vh2o = 0.0
else
    dmassa_vh2o = (massamol_h2o*n_total*frac_h2o)*tfs2
end if
WRITE(40,*)
(tfs2*1000),';',(temp_gota(j)/273.15),';',(temp_k/273.15),';',umidade,';',massa_evap,';',massa_v
ap_h2o,';',&
&dmassa_vh2o,';',(1(dmassa_vh2o/massa_vap_h2o))*100

enddo
else

umidade = umidade + umidade*tfs2
p_h2o = (umidade*p_vap_h2o)/100
frac_h2o = (umidade*p_vap_h2o)/(100*p_total)
do j=1,n
    soma = 0
    if (m==1) then
        i=compostos
        soma = soma + (difus_mass(i,j)*(p_parco_comp(i)/p_vap_comp(i)) 1.0))
    else
do i=1,m
        soma = soma + (difus_mass(i,j)*(p_parco_comp(i)/p_vap_comp(i)) 1.0))
end do
endif
d_eta(j) = ((2.0*dens_gasoso)/((raio(j)**2.0)*ro_gsl))*soma

eta(j) = (raion(j)/raio(j))**2

WRITE(10,*) 'Raio Adimensional(',j,'): ',eta(j)
soma = 0
if (m==1) then
    i=compostos
    if ((p_parco_comp(i)/p_vap_comp(i)) > 1) then
        dmassa_gota(i,j) =

```

```

4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i))1.0)
    massa_gota(i,j) =
4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i))1.0)*tfs2
    else
        dmassa_gota(i,j) = 4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((1
p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i)))
        massa_gota(i,j) = 4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((1
p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i)))*tfs2
    end if
    WRITE(10,*) 'Variabão da Massa da Gotícula: (' ,i,',' ,j,') : ',dmassa_gota(i,j)
    WRITE(10,*) 'Massa da Gotícula: (' ,i,',' ,j,') : ',massa_gota(i,j)
    soma = soma + massa_gota(i,j)
else
do i=1,m
    if ((p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i)) > 1) then
        dmassa_gota(i,j) =
4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i))1.0)
        massa_gota(i,j) =
4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i))1.0)*tfs2
    else
        dmassa_gota(i,j) = 4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((1
p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i)))
        massa_gota(i,j) = 4.0*pi*raio(j)*sqrt(eta(j))*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*((1
p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i)))*tfs2
    end if
    WRITE(10,*) 'Variabão da Massa da Gotícula: (' ,i,',' ,j,') : ',dmassa_gota(i,j)
    WRITE(10,*) 'Massa da Gotícula: (' ,i,',' ,j,') : ',massa_gota(i,j)
    soma = soma + massa_gota(i,j)
end do
endif
WRITE(10,*) " "
raion(j) = (soma/((4.0/3.0)*ro_gsl*pi))*0.33

soma = 0
do l=1,n
    soma = soma + (ncr(j)*raio(j)*(eta(j)**(3.0/2.0)))
end do

if (m==1) then
    i=compostos
    dp_t(i) =
((4.0*pi*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*r_gas)/((vol_camara/1000)*massa_mol(i)))* &
(1.0 (p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i)))*soma
    WRITE(10,*) 'Variabão da Pressão do Composto(' ,i,') : ',dp_t(i)
else
do i=1,m
    dp_t(i) =
((4.0*pi*dens_gasoso*difus_mass(i,j)*r_gas)/((vol_camara/1000)*massa_mol(i)))* &
(1.0 (p_parc_comp(i)/p_vap_comp(i)))*soma
    WRITE(10,*) 'Variabão da Pressão do Composto(' ,i,') : ',dp_t(i)
end do
endif
WRITE(10,*) " "

!!
! Aplicando o Método de RungeKutta de 4ª Ordem na Temperatura da Gotícula !
!!
soma = 0
if (m==1) then
    i=compostos
    soma = soma + ((calor_vap(i)*0.23901)*dmassa_gota(i,j))
else
do i=1,m
    soma = soma + ((calor_vap(i)*0.23901)*dmassa_gota(i,j))
end do
endif

x = temp_k
y = temp_gota(j)
h = dt/1000

k1 = h*((3.0*transf_calor)/(ro_gsl*calor_esp_gsl*raio(j)))*(x y) &
((3.0*y)/(2.0*eta(j)))*d_eta(j)(1/(calor_esp_gsl*soma_massas(j)))*soma)

```



```

dx2 = x+h/2
dy2 = y + k1/2
k2 = h*(((3.0*transf_calor)/(ro_gsl*calor_esp_gsl*raio(j)))*(dx2 dy2) &
((3.0*y)/(2.0*eta(j)))*d_eta(j) (1/(calor_esp_gsl*soma_massas(j)))*soma)

dx3 = x+h/2
dy3 = y + k2/2
k3 = h*(((3.0*transf_calor)/(ro_gsl*calor_esp_gsl*raio(j)))*(dx3 dy3) &
((3.0*y)/(2.0*eta(j)))*d_eta(j) (1/(calor_esp_gsl*soma_massas(j)))*soma)

dx4 = x+h
dy4 = y + k3
k4 = h*(((3.0*transf_calor)/(ro_gsl*calor_esp_gsl*raio(j)))*(dx4 dy4) &
((3.0*y)/(2.0*eta(j)))*d_eta(j) (1/(calor_esp_gsl*soma_massas(j)))*soma)

y = y+0.16666666666*(k1+2*k2+2*k3+k4)

WRITE(30,*) 'Temp. da Gota: K1 = ', k1, ' K2 = ', k2, ' K3 = ', k3, ' K4 = ', k4, ' y = ', y
WRITE(30,*) ' '
d_temp(j) = y*(dt/100)

if (d_temp(j) > 0) then
temp_gota(j) = temp_gota(j) d_temp(j)
else
temp_gota(j) = temp_gota(j) + d_temp(j)
end if

WRITE(10,*) 'Variação da Temperatura da Gota(',j,'): ',d_temp(j)
WRITE(10,*) 'Temperatura da Gota(',j,') : ',temp_gota(j)

massa_ar = (pressao_ini*vol_camara*massamol_ar)/(temp_k*r_gas)
massa_vap_h2o = massamol_h2o*frac_h2o*n_total
soma = 0
if (m==1) then
i=compostos
soma = soma + (ncr(i)*raion(j))
else
do i=1,m
soma = soma + (ncr(i)*raion(j))
end do
endif
massa_evap = ((4.0/3.0)*pi*ro_gsl)*soma
massa_gas = massa_ar + massa_vap_h2o + massa_evap

write(10,*) 'Massa do GBs: ',massa_gas
write(10,*) 'Massa do Vapor de Água: ',massa_vap_h2o
write(10,*) 'Massa de Gasolina Evaporada: ',massa_evap

WRITE(40,*)
(tfs2*1000),';',(temp_gota(j)273.15),';',(temp_k273.15),';',umidade,';',massa_evap,';',massa_vap_h2o,';'
&
,dmassa_vh2o,';',(1(dmassa_vh2o/massa_vap_h2o))*100

enddo

soma = 0
somal= 0
do l = 1,n
soma = soma + (ncr(l)*(raio(l)**2)*eta(l)*(temp_k temp_gota(l)))
somal = somal + (ncr(l)*V0(l)*SQRT(eta(l))*d_eta(l)*(temp_gota(l) temp_k))
end do

partel(1) = 4.0*pi*transf_calor
parte2(1) = massa_gas*calor_esp_gas
parte3(1) = (3.0/(2.0*massa_gas))*ro_gsl

alfa = (partel(1)/parte2(1))*soma + parte3(1)*somal

if (frac_h2o >= (p_vap_h2o/p_total)) then
beta = (1.0/massa_gas)*(temp_k (calor_vap_h2o/calor_esp_gas))*(massamol_h2o*vol_camara)/r_gas
else
beta = 0
endif

```

```

        if (frac_h2o >= (p_vap_h2o/p_total) .and. temp_k <= 0) then
            gama = 1
        else
            gama = 0
        endif

        WRITE(10,*) " "
        WRITE(10,*) 'Alfa: ',alfa
        WRITE(10,*) 'Beta: ',beta
        WRITE(10,*) 'Gama: ',gama
        WRITE(10,*) " "

        dtemp_gas = alfa / (1.0 + beta + gama)
        temp_k = temp_k (temp_k dtemp_gas)*tfs2

        WRITE(10,*) " "
        WRITE(10,*) 'Variapão da Temperatura do Gás: ',dtemp_gas
        WRITE(10,*) 'Nova Temperatura do Gás: ',temp_k
        WRITE(10,*) " "
    end if

    if (frac_h2o >= (p_vap_h2o/p_total)) then
        dfrac_h2o = (1.0/p_total)*dtemp_gas
    else
        dfrac_h2o = 0.0
    end if
    WRITE(10,*) " "
    WRITE(10,*) 'Variapão da Fração Volumétrica da Água: ',dfrac_h2o
    WRITE(10,*) " "

    if (frac_h2o >= (p_vap_h2o/p_total)) then
        dmassa_vh2o = (massamol_h2o*n_total*frac_h2o)*tfs2
    else
        dmassa_vh2o = 0.0
    end if

    WRITE(10,*) 'Variapão da Massa de Vapor de Água: ',dmassa_vh2o
    WRITE(10,*) " "
    soma = 0
    if (m==1) then
        i=compostos
        do l = 1,n
            soma = soma + (1/massa_mol(i))*dmassa_gota(i,j)
        end do
    else
        do i = 1,m
            do l = 1,n
                soma = soma + (1/massa_mol(i))*dmassa_gota(i,j)
            end do
        end do
    endif
    dn_total = (1.0/massamol_h2o)*dmassa_vh2o soma

    WRITE(10,*) 'Variapão do Número de Mols e o da Gasolina Evaporada: ',dn_total
    WRITE(10,*) " "

    tfs2 = tfs2 + dt/1000.0
    if (tfs2 >= tfs) then
        exit
    end if
end do

WRITE(20,*) "      ++"
WRITE(20,*) "      |      Resultados Finais      |"
WRITE(20,*) "      ++"
WRITE(20,*) " "
WRITE(20,*) "Gotículas: "
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,*) " Raio Inicial Åm      |      Raio Final Åm      | Temperatura [C "
WRITE(20,*) "++"

```

```

do j = 1,n
    temp_gota(j) = temp_gota(j) 273.15
    WRITE(20,40) raio(j), raion(j), temp_gota(j)
    40 format (' ',f12.8,' | ',f12.8,' | ',f10.3 )
end do
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,*) " "
if (massa_evap < massa_gsl) then
    soma = (1(massa_evap/massa_gsl))*100
else
    soma = (1(massa_gsl/massa_evap))*100
end if
WRITE(20,*) "Massa de Gasolina: ",massa_gsl
WRITE(20,*) "Massa de Gasolina Evaporada: ",massa_evap
WRITE(20,*) "Porcentagem de Massa Evaporada: ",soma,' %'

WRITE(20,*) " "
WRITE(20,*) "Compostos: "
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,*) " Composto | Pressão Parcial (atm) "
WRITE(20,*) "++"
if (m=1) then
    i=compostos
    WRITE(20,*) ' ',nome_composto(i),' | ',dp_t(i)
else
do i = 1,m
    WRITE(20,*) ' ',nome_composto(i),' | ',dp_t(i)
end do
endif
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,*) " "

temp_fim = (temp_k 273.15)
WRITE(20,*) "Temperatura do Gás: "
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,*) " Inicial :C | Final :C"
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,41) temp_ini, temp_fim
41 format (' ',f10.3,' | ',f10.3)
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,*) " "

WRITE(20,*) "Umidade %: "
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,*) " Inicial | Final "
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,42) umid_ini, umidade
42 format (' ',f7.3,' | ',f7.3)
WRITE(20,*) "++"
WRITE(20,*) " "

end subroutine calculo

```

# Referências Bibliográficas

- [1] FAETH, G. M.. Evaporation and Combustion of Sprays. - Progress in Energy and Combustion Science, pergamon Press, 9:1-76, 1983.
- [2] KUO, Kennneth K.. Principles of Combustion. John Wiley & Sons. 1986.
- [3] FAN, Liang-Shin, ZHU, Chao. Principles of Gás-Solid Flows. - Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- [4] SILVA, Antonio C. S. B.; NETO, José A. B. da C.; LAMBERTS, Roberto. Modelo de Evaporação de Sprays em Escoamento Livre. Anais do IX Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas. ENCIT 2002. Caxambu - MG. 2002.
- [5] BENNETT, C. O.; MYERS, J. E.. Fenômenos de transporte: quantidade de movimento, calor e massa. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil, 1978.
- [6] SHAMES, Irving H.. Mecânica dos Fluidos. Volume 1 - São Paulo: Edgar Blücher, 1973.
- [7] SHMIDT, Frank W., HENDERSON, Robert E., WOLGEMUTH, Carl H.. Introdução às Ciências Térmicas. Volume 1 - São Paulo: Edgar Blücher, 1996.
- [8] SMITH, J. M., VAN NESS, H. C., ABBOTT, M. M.. Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química. 5ª Ed. - Rio de Janeiro: LTC, 2000.
- [9] ATKINS, P.W..Physical Chemistry. Oxford University Press, 1995.
- [10] BURDEN, R. L.; FAIRES J.D. Numerical Analysis. 4th ed., PWS-Kent, Boston, 1988.
- [11] BOLDRINI, José L.; COSTA, Sueli I. R.; FIGUEIREDO, Vera L.; WETZLER, Henry G.. Álgebra Linear. 3ª Ed. - São Paulo: Harper e Row do Brasil, 1980.

- [12] VALENÇA, M. R.. Métodos Numéricos. I.N.I.C., Braga, 1988.
- [13] MUNEN, M. A.; FOULIS, D. J.. - Cálculo - LTC Livros técnicos e Científicos Editora S.A. - Vol. 2 - 1982.
- [14] RUGGIERO, Márcia A. G.; LOPES, Vera Lúcia da R.. Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais. 2ª Ed. - São Paulo: Makron Books, 1996.
- [15] BUTCHER, J. C.. The Numerical Analysis of Ordinary Equation. Wisley, Chichester 1987.
- [16] BOYCE, Willian E.; DIPRIMA, Richard C.. Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de Contorno. Ed. LTC Livros Técnicos, 529p. Rio de Janeiro, 1998.
- [17] LEFEBVRE, Arthur H.. Properties of sprays. Hemisphere Publishing Corporation. Part. Part. Syst. Charact. - pp 176 - 186, 1989.
- [18] LEFEBVRE, Arthur H.. Atomization and sprays. Hemisphere Publishing Corporation. 1989.
- [19] GRANGER, Gilles G.. A Razão. 2ª Ed - São Paulo: Editora Difusão Européia, 1969.
- [20] BIEMBENGUT, Maria S.. Modelagem e Implicações no ensino e aprendizagem. Ed. FURB, 134p. Blumenau, 1999.
- [21] SIRIGNANO, William A.. Fluid Dynamics and Transport of Droplets and Sprays. 2ª Ed. - Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [22] JEANS, James. Kinetic theory of Gases. - Cambridge: Cambridge University Press, 1967.
- [23] POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P.. The Properties of Gases and Liquids. 5th ed. - App. A, MacGraw-Hill, New York, 2001.
- [24] SPALDING, D. B.. Combustion and Mass Transfer. Capítulo 5, pp. 272-293 - Pergamon Press, New York, 1979.
- [25] SCHMEHL, R.; KLOSE, G.; MAIER G.; WITTING, S.. Efficient Numerical Calculation of Evaporating Sprays in Combustion Chamber Flows. Lehrstuhl und Institut für Thermische Strömungsmaschinen - Karlsruhe: Universität Karlsruhe (T. H.) - Germany.

- [26] CRISTO, H. Pereira. Programação em Linguagem Fortran. Arquivo Livre: Fortran.pdf; [www.geocities.com/helderpc/fortran/](http://www.geocities.com/helderpc/fortran/). Belo Horizonte, 2003.
- [27] LIDE, David R.. Handbook of Chemistry and Physics. 83th ed. CRC Press. 2002.
- [28] GASPAR, Adalberto. Física: Série Brasil. 1ª Ed - São Paulo: Editora Ática, 2004.
- [29] USBERCO, João e SALVADOR, Edgard. Química. 4ª Ed. São Paulo: Saraiva, 2001.